



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MODELOS CINÉTICOS SIMPLES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

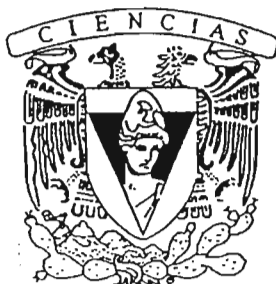
F Í S I C A

P R E S E N T A :

ELIA ECHEVERRÍA ARJONILLA

DIRECTOR DE TESIS:
DR. RAMÓN PERALTA Y FABI

2005



FACULTAD DE CIENCIAS
SECCIÓN DE CIENCIAS FÍSICAS

m. 345585



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: ELIA ECHEVERRÍA ARJONILLA

FECHA: 16 DE JUNIO DE 2005

FIRMA: [Signature]

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
 "Modelos cinéticos simples"

realizado por Echeverría Arjonilla Elia

con número de cuenta 09350510-5 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director
 Propietario Dr. Ramón Peralta y Fabi

[Signature]

Propietario Dr. Raúl Mauricio Rechtman Schrenzel

[Signature]

Propietario Dr. Iván Santamaría Hólek

[Signature]

Suplente Dr. Carlos Málaga Iguñiz

[Signature]

Suplente Dr. Víctor Manuel Romero Rochín

[Signature]

Consejo Departamental de Física

[Signature]

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PEREZ

FACULTAD DE CIENCIAS
 DEPARTAMENTO DE FÍSICA

A todos mis padres

To see the world in a grain of sand
and heaven in a wild flower,
hold infinity in the palm of your hand
and eternity in an hour.

William Blake

Agradecimientos

A Ramón Peralta y Fabi por haberme mostrado deliciosamente un pedacito de la Física y por ser mi gran maestro. Además, por su apoyo, entusiasmo, paciencia y comprensión a lo largo de este largísimo proceso.

A Eduardo Morales, Catalina Stern y Carlos Amador por sentarse a trabajar conmigo, de manera incondicional y desinteresada, en la resolución de nudos cruciales y no tan cruciales del trabajo. También, por su aliento y por su confianza.

A los sinodales por dedicarle tanto tiempo a la revisión de la tesis. Sus comentarios me permitieron ordenar, aclarar y enriquecer el trabajo.

A Jeros por revolucionar con su amor mi mundo.

A Juan y Lau por acompañarme activa y entusiastamente en este proceso y en la vida.

A Claudia Salazar por haberme ayudado amorosamente a encontrar el lugar de esta pieza en el rompecabezas y a colocarla.

También quisiera agradecer al Programa de Becas para la elaboración de Tesis de Licenciatura en Proyectos de Investigación (PROBETEL) de la UNAM, por el apoyo que me otorgó para la elaboración de este trabajo.

Resumen

En este trabajo se estudia la evolución temporal de tres modelos cinéticos simples y de velocidades discretas de la ecuación de Boltzmann: los modelos unidimensionales de Carleman y McKean y la versión bidimensional del modelo de Broadwell. Previamente se revisan las ideas centrales de la Teoría Cinética.

Se presentan las soluciones analíticas de los tres modelos cuando inicialmente las funciones de distribución de una partícula son homogéneas. Así mismo se muestra el análisis de algunos resultados numéricos de la evolución del modelo de McKean para cualquier condición inicial. Para ello se compara la evolución obtenida a partir de una simulación numérica y de un autómata celular de la dinámica correspondiente.

También, con base en el análisis efectuado sobre estos modelos, se propone uno nuevo unidimensional que considera colisiones inelásticas y se presenta la solución analítica para condiciones iniciales homogéneas. Los resultados obtenidos en este caso reflejan satisfactoriamente la dinámica de un sistema disipativo.

Estos estudios fueron realizados con el propósito de complementar el estudio del comportamiento de una avalancha bidimensional granular, en el sentido de proporcionar información para poder proponer un modelo de la dinámica entre las partículas de un sistema de este tipo.

Índice general

1. Introducción	5
1.1. Motivación	5
1.2. Planteamiento	9
2. Teoría Cinética	12
2.1. La ecuación de Boltzmann	13
2.1.1. La función de distribución de una partícula y su evolución temporal . . .	13
2.1.2. El término de colisiones	16
2.2. La evolución al equilibrio: el Teorema H de Boltzmann	23
2.3. Leyes generales de conservación	29
2.4. La teoría cinética y los medios granulados.	34
3. Modelos simples de la ecuación de Boltzmann	36
3.1. El modelo de Carleman	37
3.1.1. Caso espacialmente homogéneo	39
3.1.2. Caso estacionario	41
3.1.3. Caso general	43
3.2. El modelo de Mckean	45
3.2.1. Caso homogéneo	47
3.2.2. Caso estacionario	49
3.2.3. Caso general	50
3.3. El modelo de Broadwell	52
3.3.1. Caso homogéneo	55

3.3.2. Caso general	59
3.4. Un modelo simple con colisiones inelásticas.	60
3.4.1. Caso homogéneo	64
3.4.2. Caso general	69
4. Simulaciones numéricas del modelo de Mckean	70
4.1. Consideraciones generales	71
4.2. La primera simulación	73
4.3. La segunda simulación	86
5. Conclusiones y perspectivas	98
6. Bibliografía	102
A. Apéndice: Rutinas numéricas en Matlab	105

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Un medio granular puede definirse como un conjunto de partículas macroscópicas que interaccionan colisionando inelásticamente. Estos sistemas exhiben una gran variedad de comportamientos dependiendo de las condiciones a las que se les someta a través de una fuerza externa, de tal forma que distintos medios bajo circunstancias iguales pueden comportarse de manera diferente. Lo anterior se debe principalmente al carácter disipativo de las colisiones entre partículas, ya que modifica la física del comportamiento de estos sistemas de forma no trivial [1].

El interés en la forma en la que actúan estos materiales se ha incrementado considerablemente en los últimos años dado que se ha vuelto esencial para el entendimiento y la solución de una gran cantidad de problemas tecnológicos y científicos. Por ejemplo, el transporte, almacenamiento, separación y mezcla de granos, el transporte de sedimentos en ríos, la producción de avalanchas de rocas o nieve y la dinámica de los anillos planetarios. Sin embargo, hasta la fecha no existe una descripción fenomenológica de este tipo de materiales que resulte satisfactoria [1]-[4].

El movimiento de un medio granular puede ocurrir en diferentes regímenes, clasificándose en general como flujos granulares rápidos o flujos granulares lentos. Estos últimos están caracterizados por el contacto permanente entre los elementos del material durante el movimiento y porque las propiedades de bulto están gobernadas por fuerzas de fricción de carácter coulom-

biano entre sus componentes. En cambio, en los flujos granulares rápidos, los elementos del material interactúan a través de choques muy rápidos y pasan la mayoría del tiempo moviéndose libremente entre colisiones sucesivas. La transferencia de energía cinética y del momento en un flujo granular rápido ocurre durante las colisiones, cuya naturaleza gobierna las propiedades efectivas de transporte del material.

Usualmente el espacio entre los componentes del medio granulado está lleno de un fluido como aire o agua; por lo que, técnicamente, en un flujo granular coexisten múltiples fases. En algunos casos los elementos del medio granular pueden ser mucho más densos que el fluido intersticial de manera que sólo ellos juegan el papel relevante respecto al transporte de energía y momento dentro del material. Bajo estas condiciones el fluido intersticial se puede ignorar en la descripción del flujo granular. En otras situaciones la interacción entre las fases fluida y sólida debe que tomarse en cuenta ya que, por ejemplo, el movimiento del fluido puede ser el origen de la fuerza de arrastre para el flujo de la fase sólida [5].

El comportamiento de un flujo granular rápido es similar al de un líquido o un gas fluyendo; pero difiere esencialmente en que el movimiento y la interacción de elementos individuales sólidos no es equiparable al movimiento y la interacción de las moléculas en un sistema fluido. Las moléculas que conforman un fluido interactúan entre sí conservativamente y la disipación de energía es el resultado del comportamiento colectivo entre ellas, mientras que en un flujo granular rápido hay una pérdida de energía por cada impacto entre elementos del material debido al carácter inelástico de las colisiones y a la rugosidad de la superficie de dichos elementos. En los flujos granulares, la conversión de energía cinética en energía rotacional y en otros grados de libertad internos da lugar a un “enfriamiento” del flujo si no se le proporciona externamente más energía.

Los flujos granulares rápidos se pueden caracterizar según la naturaleza de la fuente externa que les proporcione dicha energía. Estas fuentes incluyen (i) la fuerza de gravedad, que, en particular, ocasiona flujos cortantes en superficies inclinadas; (ii) la presión del aire, que gobierna el movimiento de los componentes del medio durante transporte neumático o en camas fluidizadas; (iii) la aplicación externa de campos eléctricos o magnéticos y (iv) la inducción externa de vibración del medio [5]-[7].

La motivación para realizar este trabajo surgió de un estudio sobre la producción de avalan-

chas granulares intermitentes ocasionadas por la fuerza de atracción gravitatoria, en el contexto de buscar ecuaciones fenomenológicas de un flujo granular [8], con base en los resultados obtenidos a partir del siguiente arreglo experimental: el sistema consiste en un conjunto de esferas de vidrio del mismo tamaño que ocupan el espacio cerrado entre dos discos, planos y paralelos, de acrílico. La separación entre los discos es un poco mayor que el diámetro de las esferas, por lo que éstas se mueven prácticamente en dos dimensiones. El espacio entre los discos se llena hasta la mitad con esferas y el conjunto se hace girar de tal manera que el eje de rotación es perpendicular a las caras de los discos. De esta forma, bajo la acción del campo gravitatorio, se producen las avalanchas. El arreglo experimental se esquematiza en la figura (1-1) y los detalles se pueden consultar en las referencias bibliográficas [8, 9].

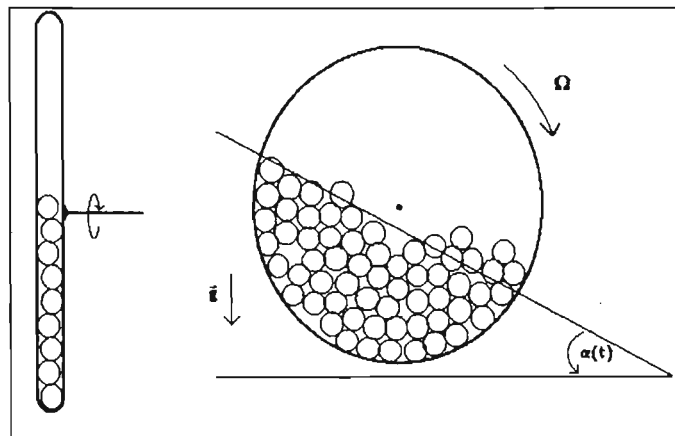


Figura 1-1: Vista lateral y frontal del arreglo del experimento de avalanchas intermitentes bidimensionales.

En la figura (1-1), $\alpha(t)$ denota al ángulo que forma la superficie libre media de las esferas con la horizontal, conforme el sistema va girando. Dado que la velocidad angular Ω con la que se hace girar al sistema es constante y es baja, se obtienen avalanchas de manera intermitente. Este proceso se observa claramente en la figura (1-2), donde se aprecia repetidamente que $\alpha(t)$ aumenta hasta un cierto ángulo crítico, y se produce una avalancha. Cabe mencionar que mientras el sistema gira sin que se produzca una avalancha, el medio granulado rota como un cuerpo rígido, y por tanto, sólo en el momento que se produce una avalancha, se tiene un flujo granular rápido.

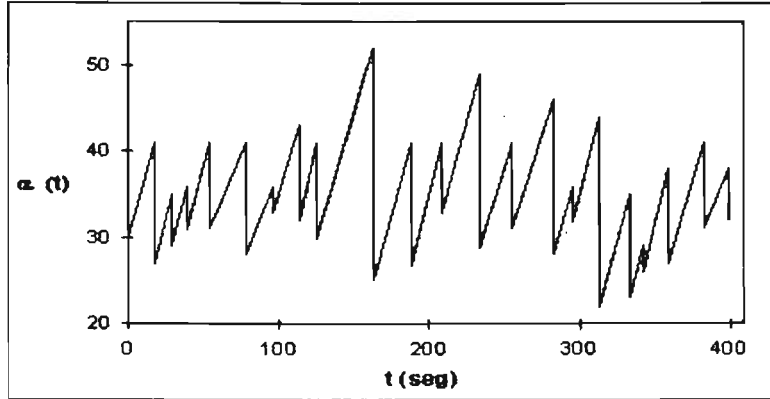


Figura 1-2: Resultado experimental que muestra el ángulo promedio, en función del tiempo, que forma la superficie libre media de esferas con la horizontal en un experimento de avalanchas bidimensionales. El ángulo promedio está medido en grados.

El análisis de estos resultados mostró que la evolución de $\alpha(t)$ se puede describir como un proceso markoviano. Esto quiere decir que la probabilidad condicional de hallar al sistema con un ángulo α al tiempo t_n , $P(\alpha, t_n)$, dado que inicialmente tenía un ángulo inicial α_0 , únicamente depende de la probabilidad condicional al tiempo anterior, $P(\alpha, t_{n-1})$ y es independiente del resto de su historia pasada.

Como sucede para todo proceso markoviano, la probabilidad $P(\alpha, t)$, debe satisfacer la ecuación de Chapman-Kolmogorov, o su versión diferencial dada por la ecuación maestra:

$$\frac{\partial P(\alpha, t)}{\partial t} + \Omega \frac{\partial P(\alpha, t)}{\partial \alpha} = \int_0^{\pi/2} [P(\alpha', t) W(\alpha | \alpha') - P(\alpha, t) W(\alpha' | \alpha) d\alpha']; \quad (1.1)$$

donde $W(\alpha^{final} | \alpha^{inicial})$ representa la probabilidad por unidad de tiempo de tener una avalancha en la cual la superficie libre media de esferas vaya desde el ángulo inicial $\alpha^{inicial}$ hasta el ángulo final α^{final} . A estos términos se les conoce como probabilidades de transición. Dadas las características del problema, las probabilidades de transición cumplen que

$$W(\alpha | \alpha') \geq 0, \quad \text{si } \alpha > \alpha', \quad (1.2)$$

y

$$W(\alpha | \alpha') = 0, \quad \text{si } \alpha' \geq \alpha. \quad (1.3)$$

Las probabilidades de transición reflejan el hecho por el cual, para un cierto ángulo $\alpha(t)$, algunas veces sí se producen avalanchas pero en otras no. Es por lo anterior que dichas probabilidades deben contener información a nivel “microscópico”; es decir, información acerca de la interacción entre los elementos del medio granulado que en este caso son esferas de vidrio. Hasta el momento se desconoce un modelo microscópico de este problema y por tanto no se cuenta con una expresión explícita para las probabilidades de transición. Mientras no se cuente con el modelo microscópico, a partir de la formulación markoviana de las avalanchas en el estado en que se encuentra, sólo se pueden deducir aspectos de carácter general [9].

A pesar de no estar completa, la formulación del comportamiento de $\alpha(t)$ como un proceso markoviano muestra un camino directo para obtener ecuaciones fenomenológicas de un sistema granular; en particular, para las avalanchas bidimensionales. Es por esto que la búsqueda o la construcción de un modelo microscópico de este sistema particular resulta ser relevante y dio pie al presente trabajo.

1.2. Planteamiento

El objetivo del presente trabajo es estudiar modelos cinéticos simples para poder construir, con base en ideas de Teoría Cinética de Gases, modelos microscópicos de flujos granulares rápidos [1, 3, 10].

En un flujo granular rápido la densidad es relativamente baja, por ello se puede suponer que la interacción entre los elementos del material se da a través de colisiones binarias. Éstas se caracterizan por durar muy poco en comparación con el tiempo que pasan los elementos del material entre colisión y colisión, como sucede en un gas. De hecho, algunos autores se refieren al régimen de flujo granular rápido como el régimen de gas granular. Bajo estas condiciones se pueden aplicar los métodos de Teoría Cinética de Gases para el estudio de su comportamiento. Dichos flujos se pueden considerar como flujos debido a que obedecen las leyes de conservación de masa y momento. Sin embargo, su dinámica es disipativa por distintas razones, esto es, la pérdida de energía se debe a que las colisiones entre los componentes del medio granular son inelásticas y no como resultado del comportamiento colectivo entre moléculas.

El atractivo del enfoque cinético reside en que proporciona un esquema para construir un

modelo de la dinámica de un gas diluido en función de la interacción entre moléculas, así como para resolver el problema de su evolución temporal por medio de la ecuación de Boltzmann. Una de las ventajas del enfoque cinético es que la ecuación de Boltzmann conduce a las ecuaciones hidrodinámicas de balance para dicho modelo, en las cuales los coeficientes de transporte quedan expresados en términos de la solución de la ecuación [2, 3]. Esto es, permite ir de una descripción microscópica a una macroscópica mediante la drástica reducción en el número de variables usadas para determinar un estado del sistema. Sin embargo, el éxito del enfoque cinético está supeditado a la obtención de soluciones de la ecuación de Boltzmann y, en la práctica, sólo se ha podido resolver para ciertos modelos de dinámicas sumamente simples y a veces carentes de significado físico.

A la fecha, la descripción teórica de un flujo granular rápido se ha basado en la ecuación cinética de Enskog-Boltzmann, que es una modificación de la ecuación de Boltzmann original[3]. Dicha ecuación considera que la interacción entre los componentes del medio es del tipo de esferas duras y que las partículas colisionan inelásticamente. A partir de ella también se obtienen ecuaciones de balance y, echando mano de ecuaciones constitutivas y de métodos numéricos, se estudia el comportamiento fenomenológico de los flujos granulares rápidos. Sin embargo, la solución exacta del problema, tanto a nivel microscópico como macroscópico, sólo se puede obtener si se resuelve la ecuación de Enskog-Boltzmann y ésta es aún más compleja que la de Boltzmann [11, 12].

Por lo anterior, ha resultado de interés para algunos científicos buscar soluciones tanto de la ecuación de Boltzmann original como de alguna modificación. Para ello algunas investigaciones [13] se han centrado en modelar la dinámica granular de tal manera que la ecuación de Boltzmann se simplifique y que se pueda resolver al menos para algunos casos. En particular, el planteamiento de este trabajo fue hacer un estudio de las características y la evolución de algunos modelos de velocidades discretas de la ecuación de Boltzmann, con la finalidad de entender mejor la dinámica que ésta contiene. En concreto, se estudian modelos muy simples uni y bidimensionales, para los que se conocen algunas soluciones y se propone un modelo cinético unidimensional introduciendo el carácter inelástico de las colisiones.

En el siguiente capítulo se presenta una revisión de las ideas y de las hipótesis centrales de la Teoría Cinética y en el tercer capítulo se introducen cuatro modelos simples de velocidades

discretas de la ecuación de Boltzmann. Se estudia analíticamente la evolución temporal y espacial de cada uno de ellos y se muestran las soluciones encontradas. Dos de los modelos, el de Carleman y Mckean, son unidimensionales y ya han sido estudiados. El tercero, el de Broadwell, es una simplicación bidimensional del modelo tridimensional original, el cual también ya fue estudiado y, el último, es un modelo unidimensional propuesto en este trabajo que considera que las colisiones son inelásticas.

En el cuarto capítulo se presentan algunos resultados sobre la evolución del modelo de Mckean, obtenidos a través de dos distintas simulaciones numéricas. La primera corresponde a una discretización de la ecuación de Boltzmann y la segunda a un autómata celular para el que se proponen ciertas reglas de movimiento y de colisión entre partículas con la finalidad de analizar la evolución de los sistemas representados. La comparación entre los resultados de ambas simulaciones resulta particularmente interesante ya que permite comprender el significado y la relevancia de la hipótesis de caos molecular en la evolución de un sistema simple regido por la ecuación de Boltzmann.

Finalmente, en el quinto capítulo se muestran las conclusiones y las perspectivas futuras de este trabajo.

Capítulo 2

Teoría Cinética

La Teoría Cinética fue propuesta hace más de un siglo con la finalidad de determinar cómo evolucionan en el tiempo las propiedades macroscópicas de un gas diluido en términos de las leyes que gobiernan el movimiento de las moléculas que lo constituyen. Fue desarrollada, entre otros, por R. Boyle (1627-1691), D. Bernoulli (1700-1782), J. Joule (1822-1889), A. Kronig (1822-1879), R. Clausius (1822-1888), C. Maxwell (1831-1879) y L. Boltzmann (1844-1906) [14].

El modelo cinético considera un gas formado por un número muy grande de moléculas que se mueven dentro de un recipiente, por lo que clásicamente las propiedades del gas dependen sólo de las fuerzas intermoleculares y las fuerzas externas que actúan sobre las moléculas y no se consideran las características internas de éstas.

Al despreciar los efectos de la estructura intramolecular, esta teoría se ocupa solamente de describir el movimiento traslacional de las partículas mediante las leyes de la mecánica clásica; suposición que es válida para los gases en casi toda condición excepto a temperaturas muy altas o muy bajas.

La forma en la que planteó Boltzmann el problema cinético, permite conectar la descripción microscópica con las cantidades y las leyes macroscópicas de la Mecánica de Fluidos. Un resultado fundamental de este planteamiento es el llamado Teorema H de Boltzmann, que fue la primera muestra del surgimiento de la irreversibilidad termodinámica a partir de las leyes reversibles de la mecánica clásica [14].

En el presente capítulo se exponen las ideas centrales de la Teoría Cinética.

2.1. La ecuación de Boltzmann

El propósito de la Teoría Cinética es hallar la función de distribución de una partícula o molécula para un gas diluido y determinada forma de interacción molecular, así como la deducción de la ecuación que gobierna la evolución temporal de esta función, la llamada ecuación de Boltzmann. Esta función debe contener todas las propiedades de equilibrio del sistema cuando $t \rightarrow \infty$, de tal forma que el propósito de la Teoría Cinética incluye la derivación de las propiedades termodinámicas del gas diluido [15]. Estas pueden obtenerse, entonces, a partir de promedios estadísticos de cantidades mecánicas tomados sobre un conjunto representativo de sistemas idénticos [16],

La virtud del planteamiento de Boltzmann reside en que la deducción de la ecuación que lleva su nombre se encuentra entre un tratamiento puramente microscópico y un análisis estocástico. En otras palabras, enfrenta de la manera más simple el problema dinámico como un problema de dos cuerpos, pero resuelve el aspecto más complejo -la aleatoriedad del movimiento molecular- al analizar el problema de manera con herramientas probabilísticas [16].

Esta sección está dedicada a la deducción de la ecuación de Boltzmann y al estudio de sus propiedades más importantes. Al final de ella se muestra el vínculo entre la descripción microscópica y la macroscópica mediante la obtención de las ecuaciones de conservación que satisface el gas; lo cual, como se verá en su momento, constituye un avance parcial respecto al objetivo principal de la Teoría Cinética.

2.1.1. La función de distribución de una partícula y su evolución temporal

Se define la función de distribución de una partícula $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$ de manera que

$$f(\vec{r}, \vec{v}; t) \Delta \vec{r} \Delta \vec{v}, \quad (2.1)$$

representa el número promedio de partículas que hay en el instante t en el volumen $\Delta \vec{r}$ centrado en \vec{r} , con velocidad dentro del elemento $\Delta \vec{v}$ centrado en \vec{v} , para un conjunto representativo de sistemas macroscópicamente idénticos. Por lo anterior, $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$ debe ser siempre mayor o igual a cero.

Es importante mencionar que el elemento de volumen $\Delta \vec{r} \Delta \vec{v}$ se supone lo suficientemente

pequeño como para que las propiedades macroscópicas no varíen dentro de él, pero suficientemente grande como para que contenga un número importante de partículas. Formalmente, esto se consigue si se considera $\Delta\vec{r}$ del orden de magnitud de la trayectoria libre media (l) que recorren las moléculas antes de interactuar unas con otras. Por ello se puede considerar que: *la función de distribución es suficientemente regular como para poder diferenciarla e integrarla de manera usual respecto a \vec{r} , \vec{v} y t .*

Lo anterior permite definir los observables macroscópicos como cantidades promedio tomadas sobre f . Por ejemplo, la densidad local $n(\vec{r}; t)$, definida de tal manera que $n(\vec{r}; t)\Delta\vec{r}$ es el número promedio de moléculas en el elemento $\Delta\vec{r}$, está dada por

$$n(\vec{r}; t) = \int d\vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}; t); \quad (2.2)$$

y el número total de partículas N en el sistema se obtiene integrando sobre \vec{r}

$$N = \int d\vec{r} n(\vec{r}; t) = \int d\vec{r} d\vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}; t). \quad (2.3)$$

En general para un gas, cualquier cantidad macroscópica local $\langle \vec{A} \rangle_{\vec{r}, t}$ puede calcularse como el promedio

$$\langle \vec{A} \rangle_{\vec{r}, t} = \frac{1}{n(\vec{r}; t)} \int d\vec{v} \vec{A}(\vec{v}) f(\vec{r}, \vec{v}; t), \quad (2.4)$$

de una función $\vec{A}(\vec{v})$ escogida apropiadamente.

La ecuación de Boltzmann es la que gobierna la evolución temporal de f . Para deducirla se trabaja en el espacio fase de seis dimensiones μ , donde cada molécula está representada por un punto $\vec{x} = (\vec{r}, \vec{v})$. La posición \vec{x} tiene asociada una velocidad $\dot{\vec{x}} = \vec{v}_\mu = \left(\vec{v}, \frac{\vec{F}}{m} \right)$, donde el punto denota la derivada temporal y \vec{F} una fuerza externa que no depende de la velocidad. La ecuación correspondiente para f toma la forma de una ecuación de continuidad en el espacio μ : la tasa de cambio del número de moléculas dentro de un volumen ω en el espacio μ es la integral del flujo de moléculas \vec{J}_μ a través de la superficie S de ω

$$\partial_t \int_\omega d\vec{x} f(\vec{r}, \vec{v}; t) = - \int_S d\vec{S} \cdot \vec{J}_\mu, \quad (2.5)$$

o, por el Teorema de Green,

$$\partial_t \int_{\omega} d\bar{x} f(\bar{r}, \bar{v}; t) = - \int_{\omega} d\bar{x} \nabla_{\mu} \cdot \vec{J}_{\mu}; \quad (2.6)$$

donde el flujo \vec{J}_{μ} está dado por $\vec{J}_{\mu} = \vec{v}_{\mu} \cdot f(\bar{r}, \bar{v}; t)$ y la divergencia en seis dimensiones por

$$\nabla_{\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial \bar{r}}, \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \right).$$

Como la ecuación (2.6) es válida para cualquier ω , se debe de cumplir que

$$\partial_t f + \nabla_{\mu} \cdot \vec{J}_{\mu} = 0, \quad (2.7)$$

o bien que

$$\partial_t f + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \bar{v}} = 0. \quad (2.8)$$

El cambio de f puede calcularse a partir de la ecuación (2.8), siempre y cuando sólo exista un flujo de moléculas que no interactúan entre sí.

Sin embargo, dado que las moléculas sí interactúan unas con otras, se tiene que agregar un término a la ecuación (2.8) para tomar en cuenta el cambio en f como consecuencia. En este caso debe cumplirse que

$$\partial_t f + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} - \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \bar{v}} + (\partial_t f)_{col} = 0, \quad (2.9)$$

donde

$$(\partial_t f)_{col} \Delta \bar{r} \Delta \bar{v} \Delta t, \quad (2.10)$$

representa el cambio debido a colisiones, en el intervalo de tiempo Δt , del número de moléculas en el elemento $\Delta \bar{r} \Delta \bar{v}$ alrededor del punto (\bar{r}, \bar{v}) en el espacio μ . Es importante resaltar que para observar este cambio, el intervalo Δt tiene que ser mucho mayor que el tiempo τ_c que duran las colisiones.

En principio, la evolución temporal de la función de distribución está determinada por la ecuación(2.9); sin embargo para escribirla en forma cerrada es necesario conocer explícitamente el término de colisiones.

2.1.2. El término de colisiones

Para deducir este término es necesario analizar la situación en la que se encuentran las moléculas de un gas dentro de un contenedor. Considerando que el gas está diluido, se puede deducir que las moléculas pasan la mayoría del tiempo viajando libremente antes de chocar con otra molécula o con las paredes del contenedor. Este tiempo entre colisiones consecutivas, llamado τ , resulta ser mucho mayor que el tiempo τ_c que dura la colisión, pero mucho menor que un tiempo macroscópico característico. Si el intervalo Δt se supone precisamente del orden de τ , la colisión puede considerarse instantánea.

Esta diferencia temporal se traduce espacialmente en la desigualdad

$$V^{\frac{1}{3}} \gg l \gg \sigma, \quad (2.11)$$

donde V es el volumen que ocupa el gas, l la trayectoria libre media que recorren las moléculas antes de interactuar y σ es un parámetro que caracteriza el alcance de las fuerzas intermoleculares. Por lo tanto, en el límite de baja densidad y habiendo N moléculas en el contenedor, se cumple que

$$N\sigma^3 \ll V. \quad (2.12)$$

En esta situación es válido suponer que sólo ocurrirán colisiones binarias, ya que la probabilidad de tener colisiones entre más de dos moléculas es menor por un factor proporcional a $\frac{N\sigma^3}{V}$. Sin embargo, también se considera que hay suficientes moléculas como para que no haya sólo choques con las paredes.

Por último, ya que el elemento $\Delta \vec{r}$ es del orden de la trayectoria libre media l y la colisión tiene lugar en una distancia del orden de σ , se puede considerar que las colisiones son locales. En otras palabras, supone que *en el límite de baja densidad sólo ocurren colisiones binarias y se considera que son instantáneas y locales en \vec{r}* .

Dada por sentada la hipótesis anterior, es posible bosquejar el término de colisión como

$$(\partial_t f)_{col} = J^+ - J^-, \quad (2.13)$$

donde J^+ y J^- están definidos como sigue:

- J^+ o **Término de ganancia**: $J^+ \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t$ es el número promedio de moléculas que entra al volumen $(\vec{r} + \Delta \vec{r}, \vec{v} + \Delta \vec{v})$ del espacio fase, durante el intervalo Δt , debido a las colisiones. Es decir, es el número de moléculas que al colisionar en $(\vec{r}, \vec{r} + \Delta \vec{r})$ adquieren una velocidad dentro del intervalo $(\vec{v}, \vec{v} + \Delta \vec{v})$ habiendo tenido una velocidad inicial \vec{v}' .
- J^- o **Término de pérdida**: $J^- \Delta \vec{r} \Delta \vec{v} \Delta t$ es el número promedio de moléculas que se pierden del volumen $(\vec{r} + \Delta \vec{r}, \vec{v} + \Delta \vec{v})$, durante el intervalo Δt , debido a las colisiones. Esto es, el número de moléculas que estando inicialmente en $(\vec{r}, \vec{r} + \Delta \vec{r})$ tenían una velocidad dentro del intervalo $(\vec{v}, \vec{v} + \Delta \vec{v})$ y que son deflectadas por colisionar adquiriendo otra velocidad \vec{v}' .

Para construir explícitamente los términos J^+ y J^- es necesario caracterizar el tipo de colisión binaria que contribuirá a cada término y analizar algunos detalles mecánicos de las mismas. Por simplicidad se supone que *las moléculas son idénticas*, de manera que son indistinguibles.

Por comodidad, se denotará a la colisión entre partículas con velocidades iniciales \vec{v}_a y \vec{v}_b y velocidades finales \vec{v}_a' y \vec{v}_b' como $\{\vec{v}_a, \vec{v}_b\} \rightarrow \{\vec{v}_a', \vec{v}_b'\}$.

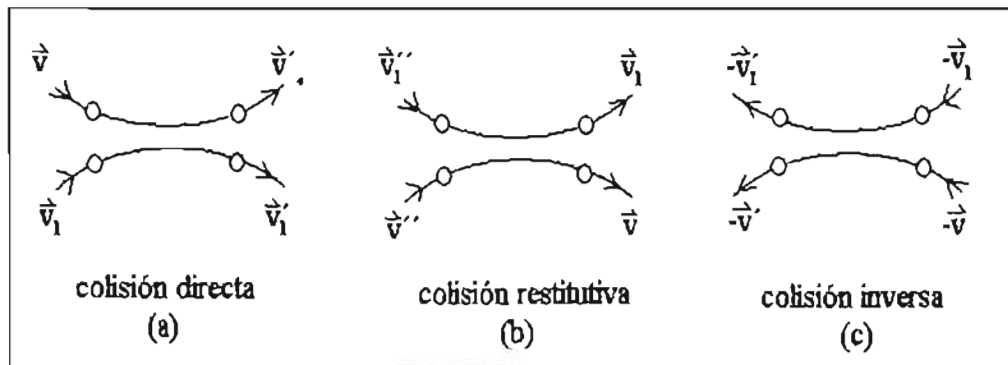


Figura 2-1: Se muestran las colisiones (a) directa, (b) restitutiva y (c) inversa en el sistema de referencia del laboratorio. Las trayectorias son curvas debido a la interacción intermolecular.

Las colisiones $\{\vec{v}, \vec{v}_1\} \rightarrow \{\vec{v}', \vec{v}_1'\}$ que suceden en $\Delta \vec{r}$, son llamadas “colisiones directas” y contribuyen al término J^- . Esto se debe a que, producto de la colisión, las velocidades se transforman de \vec{v} a \vec{v}' y de \vec{v}_1 a \vec{v}_1' por lo que se pierde una molécula del volumen $\Delta \vec{r} \Delta \vec{v}$ centrado en el punto (\vec{r}, \vec{v}) . Este tipo de colisión se ilustra en el inciso (a) de la figura(2-1).

En cambio, las colisiones $\{\vec{v}', \vec{v}_1\} \rightarrow \{\vec{v}, \vec{v}_1\}$ son las que contribuyen a J^+ . Estas son llamadas "restitutivas" porque el volumen $\Delta\vec{r}\Delta\vec{v}$, centrado en el punto (\vec{r}, \vec{v}) , gana una molécula. Se ilustran en el inciso (b) de la figura(2-1). Cabe mencionar que la colisión restitutiva no es igual a la que se conoce como "colisión inversa" y que corresponde al proceso $\{-\vec{v}', -\vec{v}_1\} \rightarrow \{-\vec{v}, -\vec{v}_1\}$. Esta colisión se muestra en el inciso (c) de la figura(2-1) y no es de interés ya que la ganancia o la pérdida de moléculas con velocidad $-\vec{v}$ no contribuye ni a J^+ ni a J^- .

Si se supone que las colisiones son elásticas se satisfacen, por conservación del momento y de la energía, las siguientes expresiones para la colisión directa:

$$\vec{v} + \vec{v}_1 = \vec{v}' + \vec{v}_1' \quad (2.14)$$

y

$$\vec{v}^2 + \vec{v}_1^2 = \vec{v}'^2 + \vec{v}_1'^2. \quad (2.15)$$

A partir de la ecuación (2.14) se pueden relacionar las velocidades involucradas como sigue

$$\vec{v} - \vec{v}' = \vec{v}_1' - \vec{v}_1 = \alpha \hat{n}, \quad (2.16)$$

donde \hat{n} es un vector unitario y α una constante cualquiera. Utilizando lo anterior para reescribir la expresión (2.15) se llega a que

$$\alpha = (\vec{v} - \vec{v}_1) \cdot \hat{n}, \quad (2.17)$$

con lo cual la relación entre las velocidades \vec{v} , \vec{v}_1 y \vec{v}' , \vec{v}_1' queda determinada por la transformación lineal biparamétrica

$$\vec{v}' = \vec{v} - [(\vec{v} - \vec{v}_1) \cdot \hat{n}] \hat{n}, \quad (2.18)$$

$$\vec{v}_1' = \vec{v}_1 + [(\vec{v} - \vec{v}_1) \cdot \hat{n}] \hat{n}. \quad (2.19)$$

Siguiendo un procedimiento equivalente para relacionar las velocidades involucradas en la colisión restitutiva, se puede demostrar que

$$(\vec{v}' - \vec{v}_1) \cdot \hat{n} = -(\vec{v} - \vec{v}_1) \cdot \hat{n}, \quad (2.20)$$

o, más aún, que

$$|(\vec{v}' - \vec{v}_1')| = |(\vec{v} - \vec{v}_1)| \quad (2.21)$$

por conservación de la energía cinética. De aquí que

$$\frac{\partial(\vec{v}, \vec{v}_1)}{\partial(\vec{v}', \vec{v}_1')} = 1, \quad (2.22)$$

que corresponde al Jacobiano de la transformación $\{\vec{v}, \vec{v}_1\} \rightarrow \{\vec{v}', \vec{v}_1'\}$. Lo anterior implica que las velocidades iniciales que dan lugar a la colisión restitutiva corresponden a las de salida de la colisión directa, por lo tanto se cumple que $\vec{v}'' = \vec{v}'$ y $\vec{v}_1'' = \vec{v}_1'$ (un análisis detallado de la dinámica de las colisiones se puede ver en [18]).

Ahora bien, resulta conveniente analizar las colisiones binarias en términos del movimiento de dos partículas virtuales, una cuya masa es la masa total del sistema $M = m_1 + m_2$ y otra con una masa reducida $\mu = m_1 \cdot m_2 / m_1 + m_2$. Dado que se ha supuesto que las partículas son idénticas, $M = 2m$, donde m es la masa de una partícula y $\mu = m/2$. Los momentos correspondientes a estas masas antes de la colisión son

$$\vec{P} = m\vec{v} + m\vec{v}_1 \quad (2.23)$$

y

$$\vec{p} = \mu(\vec{v} - \vec{v}_1), \quad (2.24)$$

llamados momento total y momento relativo respectivamente.

Bajo estas definiciones las condiciones de conservación de momento y de energía se simplifican de tal manera que

$$\vec{P} = \vec{P}' \quad y \quad |\vec{p}| = |\vec{p}'|, \quad (2.25)$$

donde la prima representa las cantidades posteriores a la colisión. Esto quiere decir que, como resultado de la colisión, el momento relativo sólo rota sin cambiar su magnitud.

Sea θ el ángulo polar entre \vec{p} y \vec{p}' y ϕ el ángulo azimutal de \vec{p} respecto a \vec{P} . Estos dos ángulos especifican por completo la cinemática de la colisión. Se denotan colectivamente con Ω y se les llama ángulos de dispersión. Si el potencial responsable de la dispersión es central (es decir, sólo

depende de la magnitud de la distancia entre moléculas), entonces la dispersión es independiente de ϕ .

La dinámica de la colisión está contenida en la sección diferencial eficaz de dispersión $d\sigma/d\Omega$, que se define como sigue. Si se considera el rayo de moléculas con velocidad \vec{v}_1 que inciden en una molécula con velocidad \vec{v} considerada como blanco, el flujo incidente I se define como el número de moléculas incidentes que atraviesan una unidad de área por segundo desde el punto de vista del blanco, por lo que

$$I = n |\vec{v} - \vec{v}_1|, \quad (2.26)$$

donde n es la densidad de moléculas que conforman el rayo incidente. La sección eficaz diferencial de dispersión está definida de manera que la cantidad

$$I \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad (2.27)$$

es el número de moléculas dispersadas por unidad de segundo dentro del elemento $d\Omega$ del ángulo sólido alrededor de la dirección Ω . La sección eficaz total de dispersión es el número de moléculas dispersadas por segundo respecto al ángulo, independientemente del ángulo de dispersión, esto es

$$\sigma_{total} = \int d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right). \quad (2.28)$$

Clásicamente, la sección diferencial eficaz de dispersión se puede calcular a partir del potencial intermolecular. Para ello se traslada el sistema de referencia al sistema del centro de masa, desde donde el momento total es cero y sólo es necesario trasladar todas las velocidades por una cantidad constante. En la figura (2-2) se muestran los ángulos de dispersión y la trayectoria de una de una partícula virtual como si fuera dispersada por un centro de fuerza fijo en O . La partícula se acerca a O con momento p , el momento relativo, y se aleja con momento relativo rotado p' . A la distancia entre la línea de aproximación y O se le llama el parámetro de impacto b . Por conservación del momento angular, también es la distancia entre la línea por la que se aleja y O . A partir de la geometría del problema se puede mostrar que

$$I \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega = I b db d\phi. \quad (2.29)$$

La relación entre el parámetro b y los ángulos de dispersión se puede determinar de la ecuación clásica para la órbita de la partícula y, a partir de ella, obtener $d\sigma/d\Omega$ como función de los ángulos de dispersión [15].

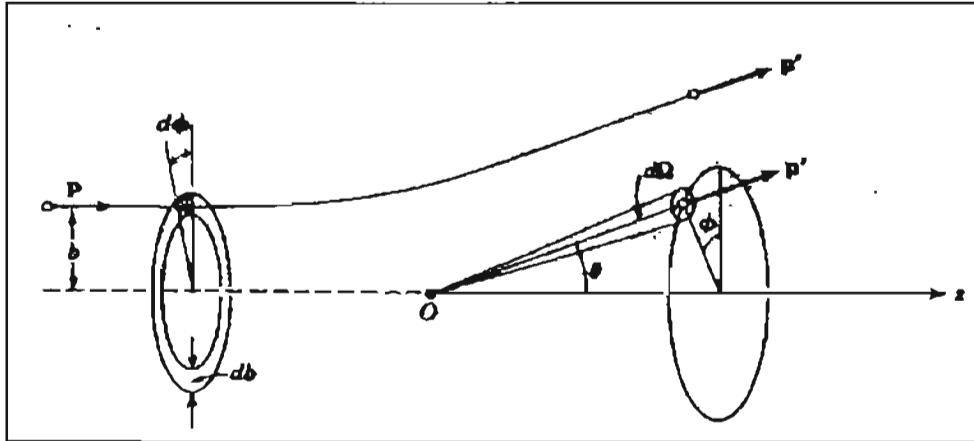


Figura 2-2: Dispersión clásica de una partícula a causa de un centro de fuerza fijo O .

Como ya se mencionó, para determinar la forma explícita de J^+ y J^- se está suponiendo que el gas está suficientemente diluido como para considerar sólo colisiones binarias. También se ignora el efecto de las fuerzas externas en las colisiones, ya que se puede asumir que cambiarán poco en el intervalo en el que actúa el potencial intermolecular.

El número de colisiones $\{\bar{v}, \bar{v}_1\} \rightarrow \{\bar{v}', \bar{v}'_1\}$ que habrá en $\Delta\bar{r}$ alrededor de \bar{r} , durante un intervalo Δt está dado por

$$(\Delta N_{v,v_1})(I d\sigma)\Delta t, \quad (2.30)$$

donde el factor dN_{v,v_1} representa el número inicial de pares de moléculas con velocidades $\{\bar{v}, \bar{v}_1\}$ que van colisionar. Se define la función de correlación entre dos partículas f^2 de tal manera que

$$\Delta N_{v,v_1} = f^2(\bar{r}, \bar{v}, \bar{v}_1; t)\Delta\bar{r}\Delta\bar{v}\Delta\bar{v}_1. \quad (2.31)$$

Considerando lo anterior, el término de pérdida queda expresado como

$$J^- \Delta\bar{r}\Delta\bar{v}\Delta t = \left[\int d\bar{v}_1 (I d\sigma) f^2(\bar{r}, \bar{v}, \bar{v}_1; t) \right] \Delta\bar{r}\Delta\bar{v}\Delta t. \quad (2.32)$$

De manera análoga se calcula el término de ganancia, obteniéndose que

$$J^+ \Delta \bar{r} \Delta \bar{v} \Delta t = \left[\int d\bar{v}_1 (I' d\sigma') f^2(\bar{r}, \bar{v}', \bar{v}_1; t) \right] \Delta \bar{r} \Delta \bar{v}' \Delta t. \quad (2.33)$$

Dado que el Jacobiano de la transformación $\{\bar{v}, \bar{v}_1\} \rightarrow \{\bar{v}', \bar{v}_1'\}$ es uno y que por conservación del momento angular $b = b'$, los términos del lado derecho de las ecuaciones (2.32) y (2.33) se pueden factorizar para expresar a la diferencia de $J^+ - J^-$ como

$$(J^+ - J^-) \Delta \bar{r} \Delta \bar{v} \Delta t = \left(\int d\bar{v}_1 (I d\sigma) [f^2(\bar{r}, \bar{v}', \bar{v}_1'; t) - f^2(\bar{r}, \bar{v}, \bar{v}_1; t)] \right) \Delta \bar{r} \Delta \bar{v} \Delta t,$$

y se puede mostrar que de esta última ecuación se obtiene que

$$(\partial_t f)_{col} = J^+ - J^- = \int d\bar{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f^2(\bar{r}, \bar{v}', \bar{v}_1'; t) - f^2(\bar{r}, \bar{v}, \bar{v}_1; t)]. \quad (2.34)$$

Esta expresión es exacta para un gas suficientemente diluido, sin embargo contiene la función de correlación f^2 que se desconoce.

Ahora bien, se puede suponer que la probabilidad de hallar simultáneamente a una molécula con velocidad \bar{v} y a una con velocidad \bar{v}_1 en $\Delta \bar{r}$ alrededor de \bar{r} es igual o es muy parecida al producto de las probabilidades de hallar a cada una por separado, es decir

$$f^2(\bar{r}, \bar{v}, \bar{v}_1; t) \approx f(\bar{r}, \bar{v}; t) \cdot f(\bar{r}, \bar{v}_1; t), \quad (2.35)$$

lo cual implica suponer que las velocidades de las dos moléculas no están correlacionadas. Esta suposición es conocida como la "hipótesis de caos molecular". Las implicaciones de esta hipótesis se discutirán en la siguiente sección, sin embargo cabe mencionar que se pueden definir las funciones de correlación f^s , que permiten calcular la probabilidad de hallar s partículas con posiciones y velocidades determinadas para un conjunto representativo de sistemas. La función f^1 es la función de distribución de la que se ha hablado a lo largo de este capítulo. Usando mecánica clásica se pueden escribir las ecuaciones exactas de movimiento para las funciones f^n y se encuentra que para hallar f^1 se necesita conocer f^2 , que a su vez depende de que se conozca f^3 y así sucesivamente hasta llegar a la función de correlación completa para s cuerpos, f^s . Este sistema de ecuaciones se conoce como la jerarquía BBGKY (iniciales de

Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon) y se puede demostrar que al truncar adecuadamente la cadena de ecuaciones se llega a la ecuación de Boltzmann [15].

Finalmente, si se considera la hipótesis (2.35), se puede reescribir la ecuación (2.34) como

$$(\partial_t f)_{col} = \int d\vec{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\vec{g}| [f(\vec{r}, \vec{v}; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1; t) - f(\vec{r}, \vec{v}; t) f(\vec{r}, \vec{v}_1; t)], \quad (2.36)$$

que al substituirse en en la ecuación (2.9) conduce a la ecuación de Boltzmann. Esta es

$$\partial_t f + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = \int d\vec{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\vec{g}| [f' f'_1 - f f_1], \quad (2.37)$$

en la cual se utiliza la abreviación $f(\vec{r}, \vec{v}; t) \rightarrow f$, $f(\vec{r}, \vec{v}_1; t) \rightarrow f_1$, $f(\vec{r}, \vec{v}'; t) \rightarrow f'$ y $f(\vec{r}, \vec{v}_1'; t) \rightarrow f'_1$; misma que se seguirá en el resto del presente trabajo.

2.2. La evolución al equilibrio: el Teorema H de Boltzmann

Dado que la ecuación (2.37) es de primer orden en t , la evolución temporal de la función de distribución $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$, es un problema de valores iniciales. Esto quiere decir que, dado el valor inicial $f(\vec{r}, \vec{v}; 0)$ de la función de distribución al tiempo $t = 0$, es de interés hallar su valor para cualquier tiempo posterior.

Boltzmann mostró que cualquier distribución inicial se aproxima en el curso del tiempo a una distribución llamada de Maxwell-Boltzmann,

$$f^{eq}(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\vec{v} - \vec{u})^2}{2k_B T} \right], \quad (2.38)$$

donde $n(\vec{r}, t)$ es el número local de partículas de masa m , k_B es la constante de Boltzmann, $T(\vec{r}, t)$ la temperatura local y $\vec{u}(\vec{r}, t)$ la velocidad local de un sistema de referencia en movimiento. También mostró que si el sistema tiende a un estado de equilibrio lo hace de manera irreversible.

Se define la función de distribución de equilibrio como la solución de la ecuación de Boltzmann que no depende del tiempo. Si se supone que no hay fuerzas externas por simplicidad, se puede considerar que la función de distribución no depende de \vec{r} ; esto es, $f = f(\vec{v}; t)$. La

función de distribución de equilibrio, denotada por $f^{eq}(\vec{v})$, satisface entonces que

$$\frac{\partial f(\vec{v}, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.39)$$

y, por la ecuación (2.37), que

$$0 = \int d\vec{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\vec{g}| [f' f'_1 - f f_1]. \quad (2.40)$$

Una condición suficiente para que $f^{eq}(\vec{v})$ satisfaga la ecuación (2.40) es

$$f^{eq}(\vec{v}) f^{eq}(\vec{v}_1) - f^{eq}(\vec{v}) f^{eq}(\vec{v}_1) = 0, \quad (2.41)$$

para cualquier colisión $\{\vec{v}, \vec{v}_1\} \rightarrow \{\vec{v}, \vec{v}_1\}$ cuya sección eficaz de dispersión no sea nula. Se puede demostrar que $f^{eq}(\vec{v})$ es independiente de $d\sigma/d\Omega$, mientras que esta última no sea nula.

Para mostrar que la ecuación (2.40) se satisface si se cumple la ecuación (2.41), Boltzmann definió el funcional $H(t)$ como

$$H(t) \equiv \int d\vec{v} f(\vec{v}, t) \ln f(\vec{v}, t), \quad (2.42)$$

donde $f(\vec{v}, t)$ es la función de distribución al tiempo t que satisface que

$$\frac{\partial f(\vec{v}, t)}{\partial t} = \int d\vec{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\vec{g}| [f' f'_1 - f f_1]. \quad (2.43)$$

La diferenciación de (2.42) conduce a

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int d\vec{v} \frac{\partial_t f(\vec{v}, t)}{\partial t} [1 + \ln f(\vec{v}, t)]; \quad (2.44)$$

por lo que la condición $\partial f(\vec{v}, t)/\partial t = 0$ implica que $dH(t)/dt = 0$. Esto significa que una condición necesaria para que $\partial f(\vec{v}, t)/\partial t = 0$ es que $dH(t)/dt = 0$. Boltzmann formuló el Teorema H, que sirve para mostrar que

$$\frac{dH(t)}{dt} = 0 \quad (2.45)$$

es equivalente a (2.41). De ello se sigue que la ecuación (2.41) es también una condición necesaria para la solución de la ecuación (2.40).

El Teorema H de Boltzmann puede establecer que si la función de distribución f satisface la ecuación de Boltzmann, entonces

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0. \quad (2.46)$$

Para probarlo, se usa la ecuación (2.43) para substituir $\partial f(\bar{v}, t)/\partial t$ en (2.44). De aquí que

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int d\bar{v} \int d\bar{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f' f'_1 - f f_1] [1 + \ln f]. \quad (2.47)$$

Cabe hacer notar que el uso de la ecuación (2.44) presupone que el estado del sistema bajo consideración satisface la hipótesis de caos molecular.

El intercambio de la variable \bar{v} por la variable \bar{v}_1 así como de las variables de integración en la expresión (2.47), no afecta a la integral porque se puede probar que los jacobianos de las transformaciones entre cualquiera de las variables \bar{v} , \bar{v}_1 , \bar{v} y \bar{v}_1' son unitarios. Si se toma la mitad de la suma de la nueva expresión y de (2.47), se obtiene que

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int d\bar{v} \int d\bar{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f' f'_1 - f f_1] [2 + \ln f]. \quad (2.48)$$

Esta integral es invariante bajo el intercambio de \bar{v} y \bar{v}_1 por \bar{v} y \bar{v}_1 porque para cada colisión hay una colisión restitutiva determinada por la misma transformación; de manera que

$$\frac{dH(t)}{dt} = -\frac{1}{2} \int d\bar{v} \int d\bar{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f' f'_1 - f f_1] [2 + \ln f]. \quad (2.49)$$

Si se toma la mitad de la suma entre las expresiones (2.48) y (2.49) se llega a que

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{1}{4} \int d\bar{v} \int d\bar{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f' f'_1 - f f_1] [\ln f f_1 - \ln f' f'_1]. \quad (2.50)$$

Se puede demostrar que

$$[f' f'_1 - f f_1] [\ln f f_1 - \ln f' f'_1] \leq 0 \quad (2.51)$$

siempre, de manera que la ecuación (2.46) se satisface en cualquier caso.

Esto quiere decir que existe un funcional de la velocidad que hace que se satisfaga la condición (2.51) y que decrece monótonicamente al transcurrir el tiempo, como una variable tipo entropía, indicando que el sistema evoluciona de manera irreversible. Lo anterior ha generado una amplia discusión ya que en la deducción de la ecuación de Boltzmann todos los elementos dinámicos considerados son reversibles. El comportamiento irreversible debe provenir, entonces, de la hipótesis de caos molecular ([16]).

Como consecuencia de la prueba del Teorema H, se deduce de la ecuación (2.50) que $dH(t)/dt$ se cumple si y sólo el integrando de (2.50) se hace igual a cero. Esto prueba que las expresiones (2.45) y (2.41) son equivalentes y que, bajo cualquier condición inicial $f(\vec{v}; t) \rightarrow f^{eq}(\vec{v})$ si $t \rightarrow \infty$. Esta función de distribución de equilibrio $f^{eq}(\vec{v})$ es conocida como la distribución de Maxwell-Boltzmann y se muestra en la expresión (2.38).

Para llegar a este resultado, considérese la ecuación (2.37). Si se le multiplica por una función arbitraria $\tilde{\psi}(\vec{v})$ y se integra sobre \vec{v} se obtiene que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (n \langle \tilde{\psi} \rangle) + \bar{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (n \langle \tilde{\psi} \rangle) + \frac{\bar{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (n \langle \tilde{\psi} \rangle) \\ &= \frac{1}{4} \int d\vec{v} \int d\vec{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f' f'_1 - f f_1] [\tilde{\psi}(\vec{v}) + \tilde{\psi}(\vec{v}_1) - \tilde{\psi}(\vec{v}') - \tilde{\psi}(\vec{v}_1)]; \end{aligned} \quad (2.52)$$

donde $\langle \tilde{\psi} \rangle = \frac{1}{n} \int d\vec{v} \tilde{\psi} f$ por la ecuación (2.4).

Esta ecuación se obtiene al haber sumado cuatro expresiones equivalentes, producto de haber un cambio de variable diferente para cada una; a saber, \vec{v} por \vec{v}_1 , \vec{v} por \vec{v}' , \vec{v}_1 por \vec{v}_1' y \vec{v}' por \vec{v}_1' . De nuevo, esta factorización es posible ya que los jacobianos de todas estas transformaciones son unitarios. Al analizar la ecuación (2.52), se dice que cualquier función que satisfaga la relación

$$\tilde{\psi}(\vec{v}) + \tilde{\psi}(\vec{v}_1) = \tilde{\psi}(\vec{v}') + \tilde{\psi}(\vec{v}_1'), \quad (2.53)$$

puesto que hace que se anule el término derecho de la ecuación (2.52), es invariante colisional. Esto es, una cantidad que no cambia durante la colisión.

Se puede demostrar que la ecuación de Boltzmann tiene asociados sólo cinco invariantes colisionales independientes [19]; a saber

$$\psi = 1, \quad (2.54)$$

por conservarse la masa,

$$\bar{\psi} = \bar{v}, \quad (2.55)$$

por conservación del momento lineal y

$$\psi = \frac{v^2}{2}, \quad (2.56)$$

ya que se conserva la energía cinética.

Por otro lado, para que la derivada de $H(t)$ sea igual a cero debe cumplirse que

$$f f_1 = f' f'_1. \quad (2.57)$$

Si se saca el logaritmo natural de esta ecuación se obtiene que

$$\ln f + \ln f_1 = \ln f' + \ln f'_1 \quad (2.58)$$

y se puede identificar inmediatamente que la función $\ln f$ es un invariante colisional. Dado que sólo existen cinco invariantes colisionales independientes, $\ln f$ debe de expresarse como combinación lineal de ellos. Convenientemente se puede escribir como

$$\ln f = \ln A - \alpha (\bar{v} - \bar{v}_0)^2, \quad (2.59)$$

o bien como

$$f^{eq}(\bar{v}) = A \exp \left[-\alpha (\bar{v} - \bar{v}_0)^2 \right]. \quad (2.60)$$

El valor de los parámetros A , α y \bar{v}_0 se obtiene al calcular con esta solución la energía total del sistema y el número total de partículas. Como resultado, tomando en cuenta la hipótesis de equilibrio local, se obtiene precisamente la distribución de equilibrio local de Maxwell-Boltzmann mostrada en la expresión (2.38).

Si se calcula $H(t)$ con $f(\bar{v}; t) = f^{eq}(\bar{v})$, donde $f^{eq}(\bar{v})$ está dada por la ecuación (2.38), se obtiene una función H de equilibrio denotada por H^{eq} . Se puede ver que

$$H^{eq} = -S_{gi}; \quad (2.61)$$

donde S_{gi} es la entropía del gas ideal. Si se cumple que

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0, \quad (2.62)$$

como en un sistema en el que $H(t)$ va alcanzando asintóticamente un valor mínimo, se estaría llegando a una condición de equilibrio a partir de la cual $H(t)$ se volvería la entropía del gas. Si así fuese, $H(t)$ representaría una generalización de la entropía

$$S(t) = -H(t), \quad (2.63)$$

para un gas fuera de equilibrio [20].

Tomando en cuenta lo anterior, se puede suponer que la evolución en general de los sistemas descritos por la ecuación de Boltzmann acopla que la función de distribución $f(\vec{r}, \vec{v}; t)$ alcance una distribución de Maxwell-Boltzmann local con que se vuelva una función homogénea en \vec{r} , de tal forma que las variables macroscópicas del sistema se vayan relajando suavemente hasta alcanzar un estado en el que no cambien respecto al tiempo [20, 21].

Vale la pena mencionar que la evolución de la función $H(t)$ está determinada por la evolución de la función de distribución $f(\vec{v}; t)$ y que ésta no necesariamente satisface la ecuación de Boltzmann. Sólo la satisface en el instante en que la hipótesis de caos molecular se cumple. La demostración del Teorema H es válida en el caso límite de un gas infinitamente diluido, por lo que indagar sobre la validez del Teorema H implica en realidad indagar sobre la validez de la hipótesis de caos molecular.

Es posible analizar el comportamiento de $H(t)$ pensando que el sistema puede estar en un estado al que le corresponda un función de distribución que satisface o no la hipótesis de caos molecular. Con base en lo anterior, se puede argumentar que $H(t)$ tendrá un máximo local en un estado en el que se satisface la hipótesis de caos molecular y que ese estado resulta ser un modelo matemático conveniente para los estados que no tienen estrictamente una distribución de Maxwell-Boltzmann. Por ello, la ecuación de Boltzmann debe considerarse válida sólo en un sentido estadístico [15].

Para ilustrar lo anterior, considérese un gas preparado en un estado inicial improbable. La curva de H como función del tiempo puede verse como la curva sólida en la figura (2-3).

Todos los puntos marcados son máximos locales de $H(t)$ (aunque no están marcados todos los máximos) y representan estados en los que se satisface la hipótesis de caos molecular para el gas.

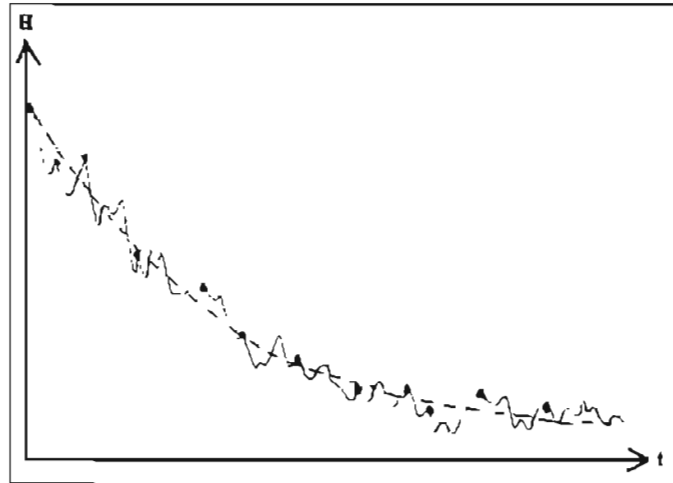


Figura 2-3: La curva sólida es $H(t)$ para un gas en un estado inicial improbable. Los puntos son instantes en los que se satisface la hipótesis de caos molecular. La curva punteada es la que se predice con la ecuación de Boltzmann.

Una solución de la ecuación de Boltzmann conducirá a la curva suave de pendiente negativa que mejor se ajuste a estos puntos, como se muestra en la figura (2-3) con la curva punteada. Es en este sentido que la ecuación de Boltzmann proporciona una descripción de cómo se acerca el sistema al equilibrio y son sólo estos argumentos los que hacen plausible utilizar la ecuación de Boltzmann para describir tal comportamiento [15].

2.3. Leyes generales de conservación

Por último, antes de retomar la discusión acerca de los medios granulados, resta comentar brevemente la conexión entre la descripción microscópica que proporciona la Teoría Cinética con la descripción macroscópica de un gas.

Una característica general de un sistema fuera de equilibrio es la existencia de propiedades de transporte. En un sistema constituido por un gas, puede haber transporte de moléculas, de momento y de energía desde una región del sistema a otra, siempre y cuando existan gra-

dientes en la densidad n , en la velocidad promedio de las moléculas \bar{u} y en la temperatura T . Esto a su vez se relaciona con las propiedades macroscópicas de difusión, viscosidad y conductividad térmica de dicho sistema. La cuestión es, entonces, determinar cómo la ecuación de Boltzmann contiene la descripción macroscópica usual del gas en términos de las ecuaciones de la hidrodinámica.

La propiedad de conservación de los invariantes colisionales sugiere que sus valores promedio obedecen ciertas ecuaciones de balance y que están relacionados con las variables hidrodinámicas n , \bar{u} y T .

Considérese un invariante colisional $\bar{\psi}(\bar{v})$ cuyo promedio, según la ecuación (2.4), está dado por

$$\langle \bar{\psi} \rangle_{\bar{r},t} = \langle \bar{\psi} \rangle = \frac{1}{n(\bar{r};t)} \int d\bar{v} \bar{\psi}(\bar{v}) f. \quad (2.64)$$

Si se multiplica la ecuación (2.37) por $\bar{\psi}(\bar{v})$ y se le integra respecto \bar{v} se obtiene que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(n \langle \bar{\psi} \rangle \right) + \bar{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(n \langle \bar{\psi} \bar{v} \rangle \right) + n \frac{\bar{F}}{m} \cdot \left\langle \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \bar{\psi} \right\rangle \\ &= \frac{1}{4} \int d\bar{v} \int d\bar{v}_1 \int d\Omega (d\sigma/d\Omega) |\bar{g}| [f' f'_1 - f f_1] \left(\bar{\psi} + \bar{\psi}_1 - \bar{\psi}' - \bar{\psi}'_1 \right), \end{aligned} \quad (2.65)$$

donde se han manipulado las variables no primadas y las primadas de la misma manera que para obtener la ecuación (2.52). Si $\bar{\psi}(\bar{v})$ es un invariante colisional, el término derecho de la ecuación (2.65) se anula, de donde

$$\partial_t \left(n \langle \bar{\psi} \rangle \right) + \bar{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\langle n \bar{v} \bar{\psi} \rangle \right) + n \frac{\bar{F}}{m} \cdot \left\langle \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \bar{\psi} \right\rangle = 0. \quad (2.66)$$

Si se substituye en esta expresión el primer invariante colisional de la ecuación de Boltzmann, $\psi = 1$ y se multiplica por la masa de cada molécula, se obtiene la siguiente expresión

$$\partial_t (\rho) + \nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0, \quad (2.67)$$

donde $\rho(\bar{r};t) = nm$ representa la densidad de masa del sistema y $\bar{u}(\bar{r},t) = \langle \bar{v} \rangle$ es la velocidad promedio. Esta ecuación es la ecuación de conservación de la masa.

Puede demostrarse de manera análoga que al substituir en la ecuación (2.66) los tres inva-

riantes $\bar{\psi}(\bar{v}) = \bar{v}$, se llega a la ecuación de conservación del momento, esta es

$$\partial_t (\bar{u}) + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} - \bar{F} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \underline{\tau} = 0; \quad (2.68)$$

Para llegar a esta ecuación se expresó a \bar{v} , de manera conveniente y sin perderde generalidad, como

$$\bar{v} = \bar{u} + \bar{\xi}, \quad (2.69)$$

donde $\bar{\xi}$ es un término fluctuante tal que $\langle \bar{\xi} \rangle = 0$. El tensor $\underline{\tau}$ que aparece en la ecuación (2.68) es conocido en Mecánica de Fluidos como el tensor de esfuerzos y está dado por

$$\underline{\tau} = \tau_{ij} = \rho \langle \xi_i \xi_j \rangle - m \int d\bar{v} \xi_i \xi_j f. \quad (2.70)$$

Representa la componente i de la fuerza por unidad de área que actúa sobre un elemento de la superficie del fluido cuya normal apunta en la dirección j [20]. Para ver una deducción detallada de la ecuación (2.68) se puede consultar [19].

Finalmente si se substituye el quinto invariante colisional $\bar{\psi}(\bar{v}) = v^2/2$ en la ecuación (2.66) se puede obtener la ecuación de conservación de la energía

$$\partial_t \left(\rho \frac{u^2}{2} + \rho \varepsilon \right) + \nabla \cdot \left[\left(\rho \frac{u^2}{2} + \rho \varepsilon \right) \bar{u} \right] - \bar{u} \cdot \rho \bar{F} + \nabla \cdot (\bar{u} \cdot \underline{\tau}) - \nabla \cdot \bar{q} = 0, \quad (2.71)$$

donde

$$\varepsilon = \left\langle \frac{\xi^2}{2} \right\rangle \quad (2.72)$$

es la energía interna por unidad de masa del sistema y

$$\bar{q} = \int d\bar{v} \bar{\xi} \frac{m \xi^2}{2} f \quad (2.73)$$

es el flujo de calor por unidad de área y tiempo [19].

Cabe notar que en las expresiones (2.70) y (2.72), el tensor $\underline{\tau}$ y el vector \bar{q} están expresados en términos de la función de distribución f , por lo que para cerrar el sistema de ecuaciones es necesario resolver la ecuación de Boltzmann.

Las ecuaciones (2.67), (2.68) y (2.71) corresponden a la forma general de las ecuaciones

hidrodinámicas de balance de un sistema y expresan la relación entre las variables macroscópicas del mismo. En el contexto de la Mecánica de Fluidos, se cuenta con las ecuaciones termodinámicas de estado de ε y p como funciones de la densidad ρ y de la temperatura T del fluido, pero no con las ecuaciones constitutivas de $\underline{\tau}$ y \bar{q} . Estas últimas son necesarias para acabar de escribir en forma cerrada el sistema de ecuaciones de balance y poderlo resolver, con la finalidad de determinar los coeficientes de transporte.

Existen algunos casos particulares para los que se conocen las ecuaciones de $\underline{\tau}$ y \bar{q} . Por ejemplo, en un fluido ideal se considera que no hay disipación ni viscosidad. Es por esto que no hay esfuerzos tangenciales ni conducción de calor y, por tanto, las ecuaciones constitutivas correspondientes son

$$\tau_{ij} = p\delta_{ij} \quad (2.74)$$

y

$$\bar{q} = 0, \quad (2.75)$$

donde $p = p(\rho, T)$ es la presión hidrostática. Al substituir estas ecuaciones en las ecuaciones (2.67), (2.68) y (2.71) se obtiene el conjunto llamado Ecuaciones de Euler.

Otro ejemplo lo constituye un fluido newtoniano (o viscoso), para el cuál las ecuaciones constitutivas son las leyes fenomenológicas de Newton y de Fourier, a saber

$$\tau_{ij} = p\delta_{ij} + \tau'_{ij} = p\delta_{ij} + \zeta\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \eta\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right) \quad (2.76)$$

y

$$\bar{q} = -k\nabla T,$$

en donde τ'_{ij} se conoce como el tensor deviatorico y corresponde a los esfuerzos viscosos u ocasionados por la disipación de energía, $\zeta = \zeta(\rho, T)$ es el coeficiente de viscosidad volumétrica o de bulo y $\eta = \eta(\rho, T)$ es el coeficiente de viscosidad cortante. Substituyendo estas expresiones en las ecuaciones (2.67), (2.68) y (2.71) se obtiene el conjunto conocido como ecuaciones de Navier-Stokes-Fourier [22, 23].

La relación que se puede establecer entre las ecuaciones de balance escritas en términos de variables microscópicas y las escritas en términos de variables macroscópicas resulta de

particular interés, ya que a partir de ella se pueden justificar, por ejemplo, las suposiciones fenomenológicas que están detrás de las leyes de Newton y de Fourier y proporcionar expresiones explícitas para los coeficientes de transporte en términos de los parámetros moleculares. Pero lo anterior queda supeditado a encontrar soluciones de la ecuación de Boltzmann [21].

Otra forma de analizar la relación entre las variables microscópicas y macroscópicas de un gas, es buscar soluciones de la ecuación de Boltzmann a partir de la linealización del término de colisiones. Uno de los métodos más utilizados para ello es el llamado desarrollo de Chapman-Enskog [2], cuyo propósito es la obtención de $\underline{\tau}$ y \underline{q} resolviendo el problema de valores iniciales para la ecuación de Boltzmann linealizada. Para ello se supone que cualquier distribución inicial del sistema evolucionará hacia un estado de equilibrio alcanzando rápidamente una distribución local de Maxwell-Boltzmann f^{eq} , ecuación (2.38). A partir de esta solución se obtienen expresiones para $\underline{\tau}$ y \underline{q} a primera aproximación. Estas expresiones coinciden con las ecuaciones constitutivas de un fluido ideal. Sin embargo, se puede esperar que después de un determinado tiempo la función de distribución no siga siendo una distribución de Maxwell-Boltzmann. Para considerar esto, se propone como solución el siguiente desarrollo en serie de perturbaciones de la función f^{eq}

$$f = f^{eq} [1 + \lambda^1 (\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{v}}, t) + \lambda^2 (\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{v}}, t) + \dots] . \quad (2.77)$$

Éste se hace de manera que la corrección a f^{eq} a n -ésimo orden obedezca una ecuación de la forma

$$f^{eq} \partial_{t_{col}} (\lambda^n) = L_n, \quad (2.78)$$

donde L_n es un operador que depende sólo de las derivadas espaciales de orden menor. Esto genera una jerarquía de relaciones λ^n cuyas condiciones de solubilidad a orden n son las ecuaciones hidrodinámicas de orden $(n - 1)$. Para el orden $n = 0$ se obtienen las ecuaciones de Euler, en el orden $n = 1$ se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes-Fourier y en los órdenes mayores se obtienen generalizaciones, llamadas de Burnett, de las ecuaciones hidrodinámicas que tienen validez solamente en casos particulares. Este desarrollo se haya ampliamente expuesto en [19, 21].

En conclusión, la teoría cinética se presenta como una herramienta para estudiar el comportamiento de un gas diluido pero no permite avanzar demasiado en la obtención de resultados

concretos mientras no se conozca una solución de la ecuación de Boltzmann.

2.4. La teoría cinética y los medios granulados.

Muchos de los aspectos del comportamiento de un medio granulado pueden ser modelados como si se tratara de un fluido de esferas duras que chocan entre sí inelásticamente. En el régimen de flujos rápidos (o de baja densidad), el comportamiento macroscópico de los granos puede describirse mediante ciertas ecuaciones hidrodinámicas que toman en cuenta el carácter disipativo de la interacción que se da entre ellas. Una de las formas de derivar dichas ecuaciones hidrodinámicas y expresiones explícitas para los coeficientes de transporte se obtiene a partir de una ecuación tipo de Boltzmann, modificada convenientemente [3, 5].

Ya que en los flujos granulares rápidos las colisiones entre granos están acompañadas por la conversión de energía cinética en energía rotacional y en otros grados de libertad, se da lugar a un fenómeno de "enfriamiento" incluso si no actúa ninguna fuerza externa [11]. Estos flujos han sido exhaustivamente modelados a través de la ecuación cinética de Enskog-Boltzmann, la cual contempla interacciones entre esferas duras, alta densidad, colisiones inelásticas no locales y una función de correlación espacial para cada par de esferas. Esto último se debe a que, para estudiar la importancia de los efectos colectivos, hay que corregir la hipótesis de caos molecular y tomar en cuenta los efectos de las correlaciones dinámicas [10].

Bajo el mismo esquema que en la Teoría Cinética, a partir de esta ecuación se llega a ecuaciones macroscópicas de balance para un fluido granular. Sin embargo, emerge el mismo problema que con la ecuación de Boltzmann: los coeficientes de transporte dependen de la solución de la ecuación de Enskog-Boltzmann y el carácter no lineal de ésta dificulta la obtención de una solución general o de alguna sugerencia sobre la evolución de los sistemas. La complejidad para obtener soluciones de esta ecuación respecto a la de Boltzmann es aún mayor.

Por otra parte, simular numéricamente el comportamiento de estos flujos en una y en dos dimensiones tampoco ha resultado ser una tarea fácil. Dado que la dinámica es disipativa, han aparecido fenómenos concernientes a la propia simulación. Un ejemplo de ello es la formación espontánea de cúmulos de granos en ciertas regiones [24].

Una de las formas en las que se ha estudiado analítica y numéricamente la evolución de

la ecuación de Boltzmann, has sido a través de los llamados modelos cinéticos de velocidades discretas. En ellos, como su nombre lo indica, la velocidad pertenece a un conjunto finito de valores discretos, de manera que el término de colisiones es más simple y puede resultar más sencillo analizar la correspondiente ecuación de Boltzmann [2]-[27]. Esta simplificación tiene como consecuencia que la probabilidad de obtener soluciones de la ecuación de Boltzmann sin un significado físico sea muy alta, sin embargo su estudio puede clarificar la dinámica que engloba la ecuación de Boltzmann y el significado de las hipótesis que involucra [26].

Capítulo 3

Modelos simples de la ecuación de Boltzmann

A pesar de ser un problema viejo, no ha dejado de existir interés en encontrar soluciones exactas de la ecuación de Boltzmann. Debido a su complejidad, algunas investigaciones han girado alrededor de modelos simples de dicha ecuación; esto es, de sistemas donde la dinámica entre partículas es muy simple y por tanto las ecuaciones de Boltzmann correspondientes son menos complejas. La finalidad de estudiar estos modelos reside en la posibilidad de encontrar soluciones de estas ecuaciones de Boltzmann reducidas y, así, examinar si estos sistemas simples efectivamente evolucionan hacia un estado de equilibrio y en qué forma lo alcanzan.

Los modelos simples de la ecuación de Boltzmann pueden carecer de significado físico real. Sin embargo, la información que se ha obtenido al estudiarlos ha sido de gran utilidad para entender en qué forma se manifiesta el comportamiento irreversible de un gas poco denso y extender este análisis a otro tipo de sistemas [13].

En este capítulo se presentan y analizan tres modelos simples de la ecuación de Boltzmann en los que las velocidades de las partículas sólo pueden tomar ciertos valores discretos. Dos de ellos, el de Carleman y el de McKean, son unidimensionales y el otro, el modelo de Broadwell, es tridimensional [13].

Se encontraron soluciones analíticas de las ecuaciones de Boltzmann para los tres modelos si inicialmente la función de distribución es homogénea espacialmente. Sin embargo, no se encon-

traron soluciones para condiciones iniciales arbitrarias. Lo anterior coincide con los resultados reportados en la literatura [13]. Aun así, su análisis aporta suficiente información para entender, en términos generales, cómo este tipo de sistemas evolucionan irreversiblemente hacia un estado de equilibrio.

Por último, se presenta y analiza otro modelo simple de la ecuación de Boltzmann. Éste fue propuesto dentro del presente trabajo con base en los estudios realizados sobre los modelos de Carleman, Mckean y Broadwell. Es un modelo unidimensional de velocidades discretas pero en él las partículas colisionan inelásticamente. Se encontró una solución analítica de la ecuación de Boltzmann correspondiente a este modelo, como para los otros modelos, si la función de de distribución es homogénea espacialmente pero no para condiciones iniciales arbitrarias.

3.1. El modelo de Carleman

Uno de los modelos más simples de la ecuación de Boltzmann es el modelo de Carleman [13]. En éste, sólo existen partículas con velocidades discretas $v = 1$ ó $v = -1$ y posiciones x tal que $x \in (-\infty, \infty)$. El número de partículas con velocidades $v = 1$ y $v = -1$ se denota por $f_+(x, t) dx$ y $f_-(x, t) dx$ respectivamente. La dinámica que siguen las partículas está definida por las colisiones binarias esquematizadas en la figura (3-1). En ella se observan las colisiones directa y restitutiva así como una tabla de las colisiones permitidas en el modelo.

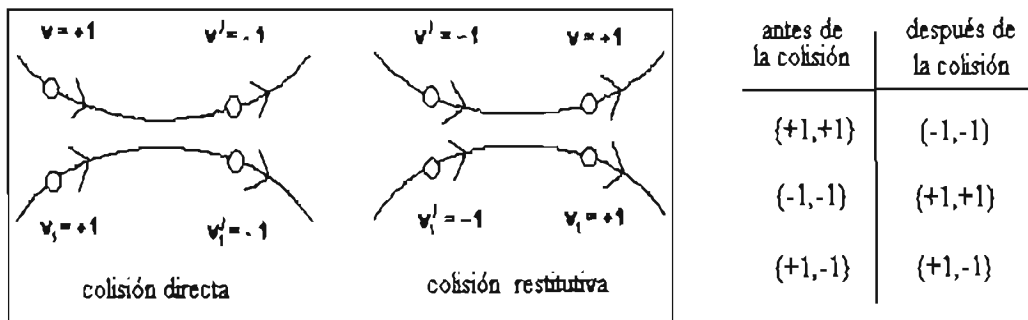


Figura 3-1: Dinámica de las colisiones del modelo de Carleman. En la tabla se muestran las velocidades de las partículas antes y después de cada una de las posibles colisiones.

Para este tipo de modelos, en ausencia de fuerzas externas, se puede construir fácilmente la

tasa de cambio de las funciones de distribución si se considera la hipótesis de caos molecular. Ésta permite calcular, por ejemplo, el término de ganancia de partículas con velocidad positiva con el producto $(f_-)(f_-)$, que corresponde al número de colisiones entre dos partículas con velocidad negativa que restituyen una partícula con velocidad positiva a dx , centrado en x . De esta manera se calculan los términos de ganancia y pérdida, de manera que

$$(\partial_t + \partial_x) f_+ = \nu (f_-^2 - f_+^2), \quad (3.1)$$

y

$$(\partial_t - \partial_x) f_- = \nu (f_+^2 - f_-^2); \quad (3.2)$$

donde ν es una constante relacionada con la frecuencia con que ocurren las colisiones. Las condiciones que debe cumplir la función de distribución total $f_{total}(x, t)$, tal que

$$f_{total}(x, t) dx = f_+(x, t) dx + f_-(x, t) dx,$$

son:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(x, t) dx = n \quad (3.3)$$

$$f_{total}(x, 0) = f_0(x), \quad (3.4)$$

y

$$f_{total}(x, t) \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (3.5)$$

Sin pérdida de generalidad se puede trabajar con funciones de distribución normalizadas de manera que la ecuación (3.3) se convierte en

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(x, t) dx = 1. \quad (3.6)$$

A partir de este momento, cuando se mencione la función de distribución se estará haciendo referencia a la función de distribución normalizada salvo cuando se especifique.

Pese a la simplicidad de este modelo no se conocen soluciones analíticas de las ecuaciones

(3.1) y (3.2) para condiciones iniciales arbitrarias [13]. Por esta razón se analizaron por separado tres distintos tipos de condiciones iniciales de las funciones de distribución; es decir, cuando son espacialmente homogéneas, cuando son estacionarias y finalmente cuando son arbitrarias, con el afán de encontrar soluciones analíticas o por lo menos indagar la forma en que el sistema evoluciona y verificar si efectivamente lo hace hacia un estado de equilibrio estacionario.

3.1.1. Caso espacialmente homogéneo

Si la función de distribución es espacialmente homogénea, es decir si $f = f(t)$, el sistema de ecuaciones (3.1) y (3.2) se puede resolver analíticamente. En este caso, las ecuaciones (3.1) y (3.2) toman la siguiente forma:

$$\dot{f}_+ = f_-^2 - f_+^2 = (f_- - f_+)(f_- + f_+) = f_- - f_+, \quad (3.7)$$

y

$$\dot{f}_- = f_+^2 - f_-^2 = (f_+ - f_-)(f_+ + f_-) = f_+ - f_-, \quad (3.8)$$

donde el punto representa la diferenciación respecto a νt y, por tanto, las ecuaciones son adimensionales. En este caso, la única condición que se impone sobre f_{total} es que

$$f_{total} = f_+(t) + f_-(t) = 1 \quad (3.9)$$

en todo t .

Para resolver este sistema se define una nueva función $h(t) \equiv f_+(t) - f_-(t)$, por lo que al restar las ecuaciones (3.7) y (3.8) se tiene que

$$\dot{h} = -2h. \quad (3.10)$$

La solución de esta ecuación diferencial es

$$h(t) = \Delta e^{-2t}, \quad (3.11)$$

donde $\Delta \equiv h(0) = f_+(0) - f_-(0)$. A partir de esta solución, de la definición de $h(t)$ y de la

condición $f_+(t) + f_-(t) = 1$, se obtienen las soluciones para $f_+(t)$ y $f_-(t)$:

$$f_{\pm} = \frac{1}{2} [1 \pm \Delta e^{-2t}]. \quad (3.12)$$

Estas soluciones cumplen que $f_{\pm} \geq 0$ siempre, lo cual es una de las propiedades fundamentales de la ecuación de Boltzmann como se expuso en la sección 2.1.2 del capítulo anterior. La evolución de $f_+(t)$ y $f_-(t)$ a las funciones de distribución de equilibrio llamadas "maxwellianas" del modelo, $f_{\pm}(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{2}$, se esquematiza en la figura (3-2).

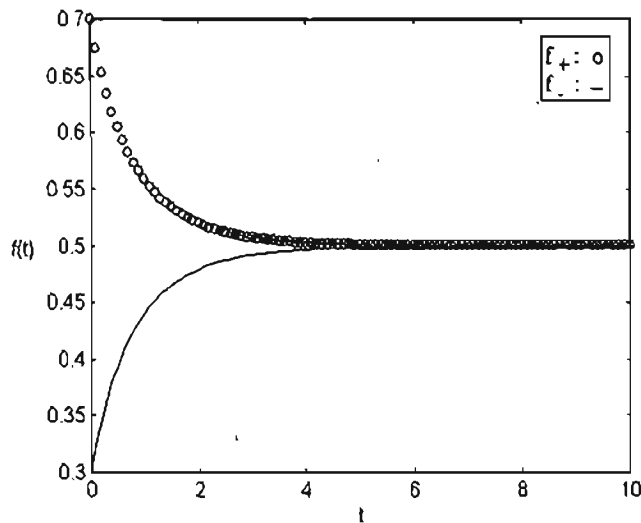


Figura 3-2: Evolución de las funciones de distribución f_+ (o) y f_- (-) en el caso homogéneo del modelo de Carleman, con las condiciones iniciales $f_+(0) = 0.7$ y $f_-(0) = 0.3$.

Cabe resaltar que este modelo obedece la leyes macroscópicas de conservación para la masa y para la energía, aunque en este caso no son independientes, pero no la de conservación de momento lineal. Ésto se deduce directamente de la dinámica impuesta, pero también se obtiene al calcular el momento total con las soluciones (3.12); tal que

$$P_{total} = \sum_i v_i f_i = (+1)f_+ + (-1)f_- = f_+ - f_- = \Delta e^{-2t}. \quad (3.13)$$

Se observa que el momento total depende del tiempo y, por tanto, no se conserva.

Para finalizar el análisis del caso homogéneo, se calculó la función $H(t)$ para este tipo de

condiciones iniciales y para este modelo. La función $H(t)$ para modelos de velocidades discretas tomo la forma

$$H(t) = \sum_i f_i \ln(f_i). \quad (3.14)$$

De esta forma, para el caso homogéneo del modelo de Carleman, $H(t)$ se obtiene al sustituir las las soluciones (3.12) en la expresión (3.14). Esta función se presenta en la figura (3-3).

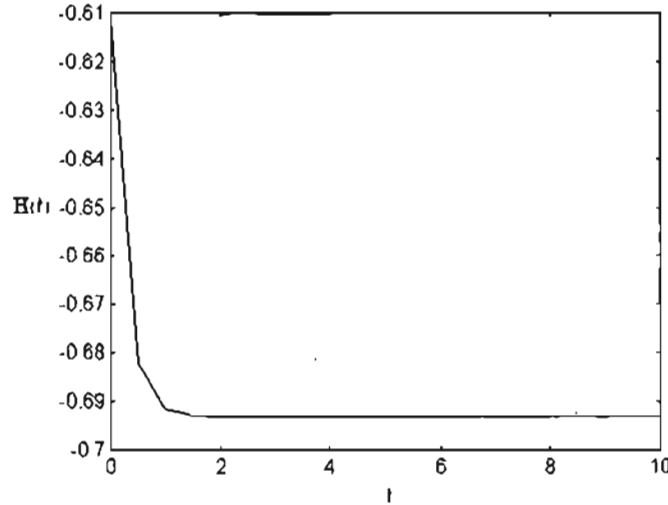


Figura 3-3: Función $H(t)$ para el caso homogéneo del modelo de Carleman.

3.1.2. Caso estacionario

Si las funciones de distribución dependen sólo de la posición, es decir $f = f(x)$, las ecuaciones (3.1) y (3.2) se modifican de la siguiente manera:

$$\partial_x f_+ = \nu (f_-^2 - f_+^2), = -\nu (f_+ + f_-) (f_+ - f_-), \quad (3.15)$$

y

$$-\partial_x f_- = \nu (f_+^2 - f_-^2) = \nu (f_+ + f_-) (f_+ - f_-), \quad (3.16)$$

con las mismas condiciones (3.6), (3.4) y (3.5) impuestas sobre la función de distribución total $f_{total}(x) = f_+(x) + f_-(x)$.

Para resolver este sistema se definen dos nuevas funciones

$$F(x) \equiv f_+(x) + f_-(x) \quad y \quad G(x) \equiv f_+(x) - f_-(x),$$

de manera que al restar las ecuaciones (3.1) y (3.2) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones para F y G :

$$F' = -2FG, \quad (3.17)$$

y

$$G' = 0. \quad (3.18)$$

En este caso la coma representa la diferenciación respecto a νx , lo cual implica que también estas ecuaciones son adimensionales ya que el término diferencial está multiplicado por la velocidad (ver ecuación (2.13)).

La solución de las ecuaciones (3.17) y (3.18) es

$$G(x) = G_0, \quad (3.19)$$

y

$$F(x) = F_0 e^{-2G_0 x}, \quad (3.20)$$

donde G_0 y F_0 son dos constantes casi arbitrarias. La única condición que se impone es que $G_0 \geq 0$.

Si se analiza esta solución se deduce que:

1. Si $x \in (-\infty, \infty)$ no hay solución puesto que $F(x)$ no es mayor o igual a cero para cualquier x .

Existe una solución si $G_0 = 0$ y $F_0 = 1$, de manera que $f_+(x) = f_-(x) = \frac{1}{2}$. Esta solución es de nuevo la función "maxwelliana" del modelo, así que no se ha obtenido una solución distinta.

2. Para $x \in [-x_1, x_2]$, para x_1 y x_2 constantes arbitrarias, se encuentra que si

$$G_0 = \frac{1}{2} F_0 (e^{-2G_0 x_1} - e^{-2G_0 x_2}), \quad (3.21)$$

se satisface la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (f_+(x) + f_-(x)) dx = 1; \quad (3.22)$$

por lo que, dada la definición de $F(x)$, debe cumplirse que $\int_{-\infty}^{\infty} F(x) dx = 1$. El valor de F_0 queda determinado en función de ésta condición, dado que de que el de G_0 se obtiene de las condiciones de frontera en x_1 y x_2 . La solución que se obtiene es

$$f_{\pm}(x) = \frac{G_0}{2} \left(\frac{e^{-2G_0x}}{e^{-2G_0x_1} - e^{-2G_0x_2}} \pm \frac{1}{2} \right), \quad (3.23)$$

siempre y cuando x pertenezca al intervalo $[-x_1, x_2]$, de tal manera que esta no es una solución para condiciones iniciales arbitrarias y por tanto es una solución particular.

3.1.3. Caso general

En esta sección se muestran los resultados de la búsqueda de soluciones analíticas de las ecuaciones de Boltzmann para condiciones iniciales arbitrarias. Como se muestra a continuación, no se encontró ninguna solución en este caso y por tanto, para ello, es necesario recurrir a un análisis numérico de la ecuación de Boltzmann.

A continuación se muestran los diferentes análisis que se realizaron con la intención de encontrar soluciones del sistema para condiciones iniciales arbitrarias:

1. Partiendo de las ecuaciones originales (3.1) y (3.2),

$$(\partial_t + \partial_x) f_+ = \nu (f_-^2 - f_+^2) = -\nu (f_+ + f_-)(f_+ - f_-), \quad (3.24)$$

y

$$(\partial_t - \partial_x) f_- = \nu (f_+^2 - f_-^2) = \nu (f_+ + f_-)(f_+ - f_-), \quad (3.25)$$

con las mismas condiciones impuestas sobre la función de distribución total; se proponen las siguientes dos funciones para desacoplar el sistema

$$F(x, t) \equiv f_+(x, t) + f_-(x, t) \quad y \quad G(x, t) \equiv f_+(x, t) - f_-(x, t).$$

A partir de esta definición, al sumar y restar las ecuaciones (3.24) y (3.25), se obtiene un nuevo sistema para las funciones F y G :

$$F_t + G_x = 0, \quad (3.26)$$

y

$$G_t + F_x = -2\nu FG, \quad (3.27)$$

donde los subíndices t y x representan la derivación parcial correspondiente a dichas variables.

De estas ecuaciones puede llegarse a la siguiente

$$F_{tt} - F_{xx} + (F)_t^2 = 0, \quad (3.28)$$

que es una ecuación de onda no lineal y de la cual tampoco se conocen soluciones analíticas generales.

2. Otro enfoque para buscar soluciones analíticas en el caso general, tomando en cuenta la ecuación (3.28), consistió en retomar las ecuaciones (3.26) y (3.27) y proponer un cambio de variable de (x, t) a las variables naturales de un sistema ondulatorio. Esto es, si $\eta \equiv x + \nu t$ y $\xi \equiv x - \nu t$, entonces $F = F(\eta, \xi)$ y $G = G(\eta, \xi)$. De aquí que el sistema de ecuaciones escrito en términos de las nuevas variables se convierta en

$$F_\eta - F_\xi + G_\eta + G_\xi = 0, \quad (3.29)$$

y

$$F_\eta + F_\xi + G_\eta - G_\xi = -2FG, \quad (3.30)$$

o, al reducirlo aun más, en

$$(F - G)_\xi = FG, \quad (3.31)$$

y

$$(F + G)_\eta = FG. \quad (3.32)$$

A pesar de la aparente simplicidad de estas ecuaciones, ni siquiera están desacopladas y otra vez se tiene que recurrir a un solución numérica para resolver el sistema. En este sentido el cambio a las variables naturales de un sistema ondulatorio no conduce a ninguna simplificación práctica del problema, aunque si da una idea del tipo de sistema físico que puede representar el modelo.

3. Finalmente, se propuso que las funciones F y G , definidas en las ecuaciones (3.26) y (3.27), mantuvieran una relación entre sí como $F = \alpha G$ para alguna constante α ; así como que F y G dependieran funcionalmente de otra función $H = H(\delta)$, por determinar, de una nueva variable definida como $\delta \equiv t - \alpha x$. De esta manera, al considerar que $F = \alpha G$ en las ecuaciones (3.26) y (3.27) se obtiene que

$$\alpha G_t + G_x = 0, \quad (3.33)$$

y

$$G_t + \alpha G_x = -2\nu\alpha G^2, \quad (3.34)$$

que pueden reducirse a

$$(1 - \alpha^2) G_x = 2\nu\alpha^2 G^2. \quad (3.35)$$

La solución de (3.35) es

$$G = \frac{1}{\beta x + \gamma}, \quad (3.36)$$

con $\beta = \frac{2\nu\alpha}{1-\alpha^2}$ y γ libre. Sin embargo esta solución no satisface la ecuación (3.33) si α es distinta de cero, por lo que otra vez no es una solución válida para condiciones iniciales arbitrarias. De lo anterior se concluye que las funciones de distribución $F(x, t)$ y $G(x, t)$, y por tanto las funciones $f_+(x, t)$ y $f_-(x, t)$, no mantienen una relación lineal entre sí como la propuesta.

3.2. El modelo de Mckean

Otro modelo simple unidimensional de velocidades discretas de la ecuación de Boltzmann es el modelo de Mckean [13]. En éste, al igual que en el modelo de Carleman, sólo existen partículas

con velocidades discretas $v = +1$ ó $v = -1$ y posiciones x tal que $x \in (-\infty, \infty)$. El número de partículas con velocidades 1 y -1 se denota de igual forma por $f_+(x, t) dx$ y $f_-(x, t) dx$, respectivamente, pero la dinámica entre las partículas está definida por otra regla de colisión. Esta dinámica se muestra en la figura (3-4).

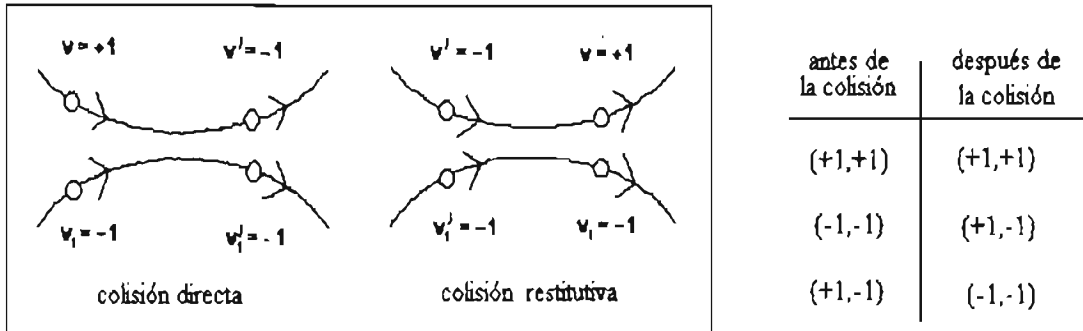


Figura 3-4: Dinámica de las colisiones del modelo de Mckean. En la tabla se muestran las velocidades de las partículas antes y después de cada una de las posibles colisiones.

Para este modelo las ecuaciones de Boltzmann, en ausencia de fuerzas externas, son

$$(\partial_t + \partial_x) f_+ = \nu (f_-^2 - f_+ f_-), \quad (3.37)$$

y

$$(\partial_t - \partial_x) f_- = \nu (f_+ f_- - f_-^2), \quad (3.38)$$

con las siguientes condiciones impuestas para la función de distribución total normalizada

$$f_{total}(x, t) = f_+(x, t) + f_-(x, t):$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(x, t) dx = 1, \quad (3.39)$$

$$f_{total}(x, 0) = f_0(x), \quad (3.40)$$

y

$$f_{total}(x, t) \rightarrow 0 \text{ si } x \rightarrow \pm\infty. \quad (3.41)$$

De nuevo, pese a la simplicidad de este modelo, la solución para condiciones iniciales arbi-

trarias se desconoce. Es por esto que, de manera análoga al análisis efectuado sobre el modelo de Carleman, se estudiaron por separado los mismos tres tipos de condiciones iniciales.

3.2.1. Caso homogéneo

Si inicialmente la función de distribución es homogénea, $f = f(t)$, la única condición que se impone sobre f_{total} es que

$$f_{total} = f_+(t) + f_-(t) = 1, \quad (3.42)$$

para todo t . En esta situación las ecuaciones (3.37) y (3.38) toman la siguiente forma:

$$\dot{f}_+ = f_-^2 - f_+ f_- = -\nu f_- (f_+ - f_-), \quad (3.43)$$

y

$$\dot{f}_- = f_+ f_- - f_-^2 = \nu f_- (f_+ - f_-), \quad (3.44)$$

donde el punto representa la diferenciación respecto a νt y, por tanto, las ecuaciones son adimensionales.

Este sistema se puede resolver analíticamente. Para hacerlo se define una nueva función $h(t)$ como $h(t) \equiv f_+(t) - f_-(t)$, por lo que al restar las ecuaciones (3.43) y (3.44) se encuentra una ecuación diferencial para ella:

$$\dot{h} = -h(1 - h). \quad (3.45)$$

La solución de esta ecuación se encuentra al integrar desde $t = 0$ hasta t , resultando que

$$h(t) = \frac{-h(0)e^{-t}}{1 - h(0)(1 - h(0)e^{-t})}. \quad (3.46)$$

A partir de la definición de $h(t)$, de la solución (3.46) y de la condición $f_+(t) + f_-(t) = 1$ se obtienen las soluciones analíticas para las funciones originales f_+ y f_- ; a saber

$$f_{\pm}(t) = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\Delta e^{-t}}{1 - \Delta(1 - \Delta e^{-t})} \right], \quad (3.47)$$

donde $\Delta \equiv f_+(0) - f_-(0)$. Se observa que la evolución temporal de f_+ y f_- depende de manera no lineal de las condiciones iniciales y que éstas efectivamente evolucionan hacia las funciones

de distribución de equilibrio (o maxwellianas del modelo), $f_{\pm}(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{2}$, como se muestra en la figura (3-5).

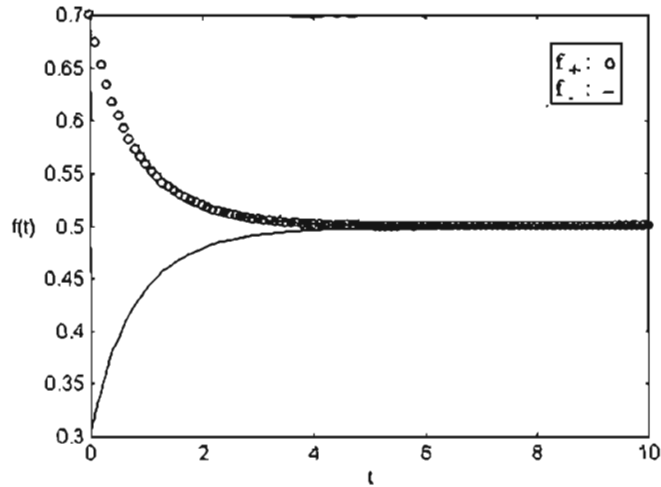


Figura 3-5: Evolución de las funciones de distribución f_+ (o) y f_- (-) con las condiciones iniciales $f_+(0) = 0,7$ y $f_-(0) = 0,3$.

De manera similar a lo que sucede en el modelo de Carleman, en el modelo de McKean se cumple por construcción la conservación de las leyes de conservación de masa y de energía, que en este caso tampoco son independientes, pero se viola la conservación de momento. Esto se ve claramente al calcular con las soluciones (3.47) el momento total

$$P_{total} = \sum_i v_i f_i = (+1)f_+ + (-1)f_- = f_+ - f_- = \frac{2\Delta e^{-t}}{1 - \Delta(1 - \Delta e^{-t})}, \quad (3.48)$$

ya que este depende del tiempo.

La función $H(t)$ de este caso y este modelo se calcula substituyendo las soluciones (3.47) en la expresión (3.14). Esta se muestra en la figura (3-6).

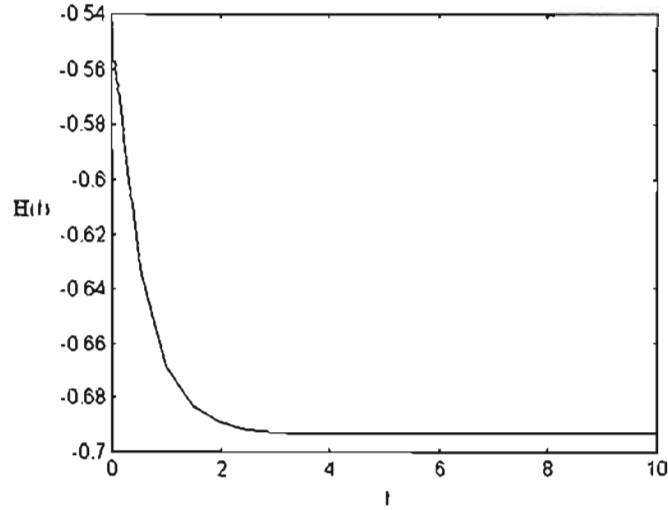


Figura 3-6: Función $H(t)$ para el caso homogéneo del modelo de McKendrick.

3.2.2. Caso estacionario

Si la función de distribución sólo depende de la posición, es decir $f = f(x)$, las ecuaciones (3.37) y (3.38) se modifican de la siguiente manera:

$$\partial_x f_+ = \nu (f_-^2 - f_+ f_-), = -\nu f_- (f_+ - f_-), \quad (3.49)$$

y

$$-\partial_x f_- = \nu (f_+ f_- - f_-^2) = \nu f_- (f_+ - f_-), \quad (3.50)$$

con las condiciones (3.39), (3.40) y (3.41) impuestas sobre la función de distribución total $f_{total}(x) = f_+(x) + f_-(x)$.

Para desacoplar este sistema de ecuaciones se definen dos nuevas funciones

$$F(x) \equiv f_+(x) + f_-(x) \quad y \quad G(x) \equiv f_+(x) - f_-(x),$$

de tal forma que al restar las ecuaciones (3.49) y (3.50) se obtiene un sistema correspondiente a las nuevas funciones:

$$F' = -G(F - G), \quad (3.51)$$

y

$$G' = 0. \quad (3.52)$$

De nuevo, en estas ecuaciones la coma representa la diferenciación respecto a νx por lo que son ecuaciones adimensionales (ya que el término diferencial está multiplicado por la velocidad).

La solución de estas ecuaciones es

$$F = F_0 e^{-G_0 x} + G_0, \quad (3.53)$$

y

$$G = G_0, \quad (3.54)$$

con G_0 y F_0 constantes determinadas mediante las condiciones de frontera y normalización. Como en el caso del modelo de Carleman, esta solución conduce a las "maxwellianas" del modelo; es decir, es una solución particular.

3.2.3. Caso general

De la misma manera que en el modelo de Carleman, no se encontraron soluciones analíticas para condiciones iniciales arbitrarias. A continuación se muestran los diferentes análisis que se realizaron, al igual que con el modelo de Carleman, con la intención de encontrar soluciones del sistema en el caso general:

1. Partiendo de las ecuaciones originales (3.37) y (3.38),

$$(\partial_t + \partial_x) f_+ = \nu (f_-^2 - f_+ f_-) = -\nu f_- (f_+ - f_-), \quad (3.55)$$

y

$$(\partial_t - \partial_x) f_- = \nu (f_+ f_- - f_-^2) = \nu f_- (f_+ - f_-), \quad (3.56)$$

con las mismas condiciones (3.39), (3.40) y (3.41) impuestas sobre la función de distribución total $f_{total}(x, t) = f_+(x, t) + f_-(x, t)$; se proponen dos nuevas funciones para desacoplar el sistema, $F(x, t) \equiv f_+(x, t) + f_-(x, t)$ y $G(x, t) \equiv f_+(x, t) - f_-(x, t)$.

A partir de esta definición, al sumar y restar las ecuaciones (3.55) y (3.56), se obtiene un

nuevo sistema para F y G :

$$F_t + G_x = 0, \quad (3.57)$$

y

$$G_t + F_x = \nu G(G - F), \quad (3.58)$$

donde los subíndices t y x representan la derivación parcial correspondiente a dichas variables.

A partir estas ecuaciones puede llegarse a la siguiente

$$F_{tt} - F_{xx} + \nu F F_t = 0; \quad (3.59)$$

que es una ecuación de onda no lineal, de la cual tampoco se conocen soluciones analíticas generales.

2. Tomando en cuenta la ecuación (3.59), se propuso un cambio de variable de (x, t) a las variables naturales de un sistema ondulatorio en las ecuaciones (3.55) y (3.56). Esto es, si $\eta \equiv x + \nu t$ y $\xi \equiv x - \nu t$, entonces $F = F(\eta, \xi)$ y $G = G(\eta, \xi)$. De aquí que el sistema de ecuaciones escrito en términos de las nuevas variables se transforme en

$$F_\eta - F_\xi + G_\eta + G_\xi = 0, \quad (3.60)$$

y

$$F_\eta + F_\xi + G_\eta - G_\xi = \nu G(G - F), \quad (3.61)$$

o, al reducirlo aun más, en

$$(F - G)_\xi = \frac{1}{2} G(G - F), \quad (3.62)$$

y

$$(F + G)_\eta = \frac{1}{2} G(G - F). \quad (3.63)$$

Otra vez, a pesar de la aparente simplicidad de estas ecuaciones, ni siquiera están desacopladas y se tiene que recurrir a un solución numérica para resolver el sistema.

3.3. El modelo de Broadwell

Un tercer modelo de velocidades discretas de la ecuación de Boltzmann, menos simple que los modelos de Carleman y McKean, es el modelo tridimensional de Broadwell [13]. En este modelo las partículas sólo pueden tener alguna de las siguientes seis velocidades discretas $\vec{v} = (\pm 1, 0, 0)$, $\vec{v} = (0, \pm 1, 0)$ ó $\vec{v} = (0, 0, \pm 1)$ y su posición \vec{r} es una variable continua de R^3 . El número de partículas con la velocidad correspondiente se denota por $f_{\pm x}(\vec{r}, t) d\vec{r}$, $f_{\pm y}(\vec{r}, t) d\vec{r}$ y $f_{\pm z}(\vec{r}, t) d\vec{r}$ respectivamente. La dinámica que siguen las partículas es tal que sólo pueden colisionar dos partículas cuyas velocidades sean opuestas. La dispersión es isotrópica, por lo que las partículas tienen la misma probabilidad de salir en cualquiera de las direcciones x, y ó z después de la colisión. Lo anterior se esquematiza en la figuras (3-7) y (3-8)

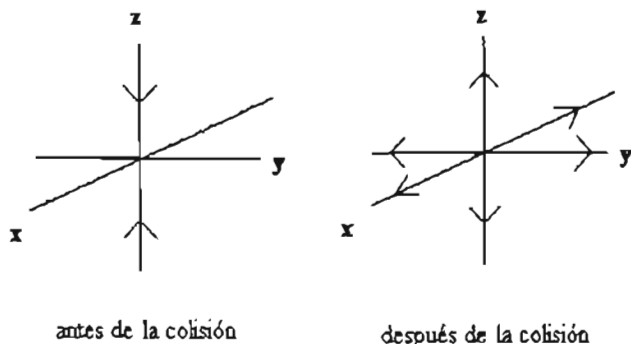


Figura 3-7: Dinámica de las colisiones en el modelo de Broadwell, ejemplificada por una colisión entre partículas con velocidad $\vec{v} = (0, 0, 1)$ y $\vec{v} = (0, 0, -1)$.

antes de la colisión	después de la colisión
$\{(+1,0,0),(+1,0,0)\}$	$\{(+1,0,0),(+1,0,0)\} \delta \{(+1,0,0),(-1,0,0)\} \delta \{(0,+1,0),(0,-1,0)\}$
$\{(0,+1,0),(0,-1,0)\}$	$\{(+1,0,0),(+1,0,0)\} \delta \{(+1,0,0),(-1,0,0)\} \delta \{(0,+1,0),(0,-1,0)\}$
$\{(0,0,+1),(0,0,-1)\}$	$\{(+1,0,0),(+1,0,0)\} \delta \{(+1,0,0),(-1,0,0)\} \delta \{(0,+1,0),(0,-1,0)\}$

Figura 3-8: En la tabla se muestran las velocidades de las partículas antes y después de cada una de las posibles colisiones. Ninguna otra colisión está permitida.

Para este modelo las ecuaciones de Boltzmann, en coordenadas cartesianas y en ausencia de fuerzas externas, son:

$$(\partial_t + \partial_x) f_{+x} = \nu \left[\frac{1}{3} (f_{+y} f_{-y} + f_{+z} f_{-z}) - \frac{2}{3} f_{+x} f_{-x} \right], \quad (3.64)$$

$$(\partial_t - \partial_x) f_{-x} = \nu \left[\frac{1}{3} (f_{+y} f_{-y} + f_{+z} f_{-z}) - \frac{2}{3} f_{+x} f_{-x} \right], \quad (3.65)$$

$$(\partial_t + \partial_y) f_{+y} = \nu \left[\frac{1}{3} (f_{+x} f_{-x} + f_{+z} f_{-z}) - \frac{2}{3} f_{+y} f_{-y} \right], \quad (3.66)$$

$$(\partial_t - \partial_y) f_{+y} = \nu \left[\frac{1}{3} (f_{+x} f_{-x} + f_{+z} f_{-z}) - \frac{2}{3} f_{+y} f_{-y} \right], \quad (3.67)$$

y

$$(\partial_t + \partial_z) f_{+z} = \nu \left[\frac{1}{3} (f_{+x} f_{-x} + f_{+y} f_{-y}) - \frac{2}{3} f_{+z} f_{-z} \right], \quad (3.68)$$

$$(\partial_t - \partial_z) f_{+z} = \nu \left[\frac{1}{3} (f_{+x} f_{-x} + f_{+y} f_{-y}) - \frac{2}{3} f_{+z} f_{-z} \right]. \quad (3.69)$$

donde ν es, de nuevo, una constante relacionada con la frecuencia de colisión.

Cabe destacar que, en todas las ecuaciones precedentes, el caso cuyas velocidades posteriores a la colisión coinciden en dirección con las velocidades previas a ella -con probabilidad de ocurrencia de un tercio-, no contribuye al conteo ni en el término de ganancia ni en el de pérdida. Esto se debe a que lo anterior es equivalente a suponer que las partículas que se mueven con sentidos opuestos se cruzan sin interactuar.

Las condiciones impuestas sobre la función de distribución total

$$f_{total}(\vec{r}, t) d\vec{r} = [f_{+x}(\vec{r}, t) + f_{-x}(\vec{r}, t)] dx + [f_{+y}(\vec{r}, t) + f_{-y}(\vec{r}, t)] dy + [f_{+z}(\vec{r}, t) + f_{-z}(\vec{r}, t)] dz$$

son:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1, \quad (3.70)$$

$$f_{total}(\vec{r}, 0) = f_0(\vec{r}), \quad (3.71)$$

y

$$f(\vec{r}, t) \rightarrow 0 \text{ si } x, y \text{ ó } z \rightarrow \pm\infty. \quad (3.72)$$

Como se vió con anterioridad, para los modelos de Carleman y de Mckean no fue posible obtener soluciones analíticas de las correspondientes ecuaciones de Boltzmann considerando condiciones iniciales generales. Esta situación se ve agravada en el caso de un modelo tridimensional; en donde hay que resolver -en el caso más simple- un sistema de seis ecuaciones diferenciales parciales acopladas no lineales. Ernst [13] menciona que no pudo encontrar, ni siquiera para el caso homogéneo, una solución considerando condiciones iniciales generales de las ecuaciones de Boltzmann correspondientes y Broadwell, en su artículo original [28], resuelve las ecuaciones sólo para ciertas condiciones iniciales particulares y funciones de distribución estacionarias.

Por lo anterior, en el presente trabajo se estudió una simplificación del modelo de Broadwell en la que se considera un espacio bidimensional y no tridimensional. La posición \vec{r} de las partículas es, entonces, una variable continua de R^2 , las velocidades permitidas son $\vec{v} = (\pm 1, 0)$ y $\vec{v} = (0, \pm 1)$ y las partículas interactúan exactamente bajo la misma dinámica descrita en el modelo original. En ausencia de fuerzas externas, las ecuaciones de Boltzmann correspondientes son:

$$(\partial_t + \partial_x) f_{+x} = \frac{1}{2} \nu (f_{+y} f_{-y} - f_{+x} f_{-x}), \quad (3.73)$$

$$(\partial_t - \partial_x) f_{-x} = \frac{1}{2} \nu (f_{+y} f_{-y} - f_{+x} f_{-x}), \quad (3.74)$$

$$(\partial_t + \partial_y) f_{+y} = \frac{1}{2} \nu (f_{+x} f_{-x} - f_{+y} f_{-y}), \quad (3.75)$$

y

$$(\partial_t - \partial_y) f_{-y} = \frac{1}{2} \nu (f_{+x} f_{-x} - f_{+y} f_{-y}); \quad (3.76)$$

con las mismas condiciones (3.70), (3.71) y (3.72) -adecuadas para un espacio bidimensional- impuestas sobre la función de distribución total correspondiente

$$f_{total}(\vec{r}, t) d\vec{r} = [f_{+x}(\vec{r}, t) + f_{-x}(\vec{r}, t)] dx + [f_{+y}(\vec{r}, t) + f_{-y}(\vec{r}, t)] dy.$$

Para esta simplificación del modelo de Broadwell se encontró una solución analítica para condiciones iniciales homogéneas, la cual se muestra a continuación. De aquí en adelante, al mencionar el modelo de Broadwell, se estará haciendo referencia al modelo simplificado y no al original.

3.3.1. Caso homogéneo

Para hacer más sencilla la lectura, se va a usar la siguiente notación:

$$f_{\pm x} \equiv F_{\pm} \quad y \quad f_{\pm y} \equiv G_{\pm}.$$

Para funciones de distribución homogéneas las ecuaciones de Boltzmann de este modelo (en ausencia de fuerzas externas) se reducen de la siguiente manera:

$$\dot{F}_+ = \frac{1}{2}(G_+G_- - F_+F_-), \quad (3.77)$$

$$\dot{F}_- = \frac{1}{2}(G_+G_- - F_+F_-), \quad (3.78)$$

$$\dot{G}_+ = \frac{1}{2}(F_+F_- - G_+G_-), \quad (3.79)$$

y

$$\dot{G}_- = \frac{1}{2}(F_+F_- - G_+G_-); \quad (3.80)$$

donde el punto representa la diferenciación respecto a νt y, por tanto, las ecuaciones son adimensionales.

La única condición que se impone sobre f_{total} en este caso es

$$f_{total} = F_+(t) + F_-(t) + G_+(t) + G_-(t) = 1 \quad (3.81)$$

para todo tiempo t . En particular para $t = 0$, si las condiciones iniciales son $F_+(0) = k_1$, $F_-(0) = k_2$, $G_+(0) = k_3$ y $G_-(0) = k_4$, tal que $0 \leq k_i \leq 1$ para $i = 1, 2, 3$ ó 4 , lo anterior implica que

$$k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = 1. \quad (3.82)$$

Para resolver analíticamente el sistema de ecuaciones (3.77)-(3.80), hay que desacoplarlo

primero. Combinando las cuatro ecuaciones del sistema se obtiene que

$$\frac{d}{dt}(F_+ + G_+) = 0 \Rightarrow F_+ + G_+ = c_1, \quad (3.83)$$

$$\frac{d}{dt}(F_+ + G_-) = 0 \Rightarrow F_+ + G_- = c_2, \quad (3.84)$$

$$\frac{d}{dt}(F_- + G_+) = 0 \Rightarrow F_- + G_+ = c_3, \quad (3.85)$$

y

$$\frac{d}{dt}(F_- + G_-) = 0 \Rightarrow F_- + G_- = c_4; \quad (3.86)$$

donde c_i , con $i = 1, 2, 3$ o 4 , son otras constantes. De nueva cuenta, como las relaciones obtenidas son válidas para todo t , el que se cumplan en particular para $t = 0$ permite determinar el valor de las constantes c_i en función de las constantes k_i . Esto es, a partir de las ecuaciones (3.83)-(3.86) se encuentra que

$$k_1 + k_3 = c_1,$$

$$k_1 + k_4 = c_2,$$

$$k_2 + k_3 = c_3,$$

y

$$k_2 + k_4 = c_4.$$

Entonces, utilizando lo anterior, de las mismas ecuaciones (3.83)-(3.86) se pueden obtener las relaciones necesarias para escribir a cualquiera de las funciones F_+ , F_- , G_+ o G_- en términos de alguna de ellas y de una combinación de constantes. Por ejemplo, en términos de F_+ las otras tres funciones se escriben como sigue:

$$F_- = F_+ + (c_3 - c_1) = F_+ + (k_2 - k_1), \quad (3.87)$$

$$G_+ = c_1 - F_+ = -F_+ + (k_1 + k_3), \quad (3.88)$$

y

$$G_- = c_2 - F_+ = -F_+ + (k_1 + k_4). \quad (3.89)$$

De esta manera, las ecuaciones (3.77)-(3.80) quedan desacopladas y su solución se obtiene al resolver una de las ecuaciones (escrita en términos de una sola función). Las otras tres soluciones se calculan a partir de ella. Siguiendo con el ejemplo, lo anterior corresponde a resolver la ecuación diferencial de F_+ ,

$$\dot{F}_+ = \frac{1}{2} (G_+ G_- - F_+ F_-) = \frac{1}{2} [(k_1 + k_3)(k_1 + k_4) - F_+],$$

cuya solución, tal que $F_+(0) = k_1$, es

$$F_+(t) = (k_1 k_2 - k_3 k_4) e^{-\frac{1}{2}t} + (k_1 + k_3)(k_1 + k_4). \quad (3.90)$$

Las otras tres soluciones se obtienen combinando este resultado con las ecuaciones (3.87), (3.88) y (3.89), de donde se obtiene que

$$F_-(t) = (k_1 k_2 - k_3 k_4) e^{-\frac{1}{2}t} + k_2(1 - k_1) + k_3 k_4, \quad (3.91)$$

$$G_+(t) = (k_1 + k_3)(k_2 + k_3) - (k_1 k_2 - k_3 k_4) e^{-\frac{1}{2}t}, \quad (3.92)$$

y

$$G_-(t) = (k_1 + k_4)(k_2 + k_4) - (k_1 k_2 - k_3 k_4) e^{-\frac{1}{2}t}. \quad (3.93)$$

Se puede comprobar que de estas soluciones se recuperan las condiciones iniciales en $t = 0$ y que satisfacen la condición de normalización dada por la ecuación (3.81) para todo t . Además debe de cumplirse que cada una de las soluciones (3.90)-(3.93), por separado, sea mayor o igual a cero y menor o igual a uno, dado que $0 \leq k_i \leq 1$ para $i = 1, 2, 3$ o 4 . Lo anterior se cumple dado que el rango de la función exponencial corresponde al intervalo $[0, 1]$ y las soluciones evaluadas en los extremos correspondientes (i.e., en $t = 0$ y $t \rightarrow \infty$) cumplen con las condiciones.

Las maxwellianas o funciones de distribución estacionarias en este caso, resultan ser

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F_+(t) \equiv F_+(\infty) = (k_1 + k_3)(k_1 + k_4), \quad (3.94)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F_-(t) \equiv F_-(\infty) = k_2(1 - k_1) + k_3 k_4, \quad (3.95)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} G_+(t) \equiv G_+(\infty) = (k_1 + k_3)(k_2 + k_3), \quad (3.96)$$

y

$$\lim_{t \rightarrow \infty} G_-(t) \equiv G_-(\infty) = (k_1 + k_4)(k_2 + k_4). \quad (3.97)$$

Estos resultados no siguen la misma tendencia que se observa en los casos homogéneos de los modelos de Carleman y McKean, en donde los valores que adquieren las maxwellianas no sólo son independientes de las condiciones iniciales sino que además son iguales entre sí. Sin embargo, una forma de comprobar que las ecuaciones (3.94)-(3.97) corresponden efectivamente a las maxwellianas es verificar que la igualdad $F_+(\infty)F_-(\infty) = G_+(\infty)G_-(\infty)$ se satisfaga, ya que esta es la condición de equilibrio (ver la sección 2.1.2 del capítulo anterior) y se trata de invariantes colisionales. De (3.94)-(3.97) se tiene que dicha igualdad siempre se cumple.

En la figura (3-9) se muestra la evolución temporal de las soluciones (3.90)-(3.93) a estas maxwellianas, para ciertas condiciones iniciales.

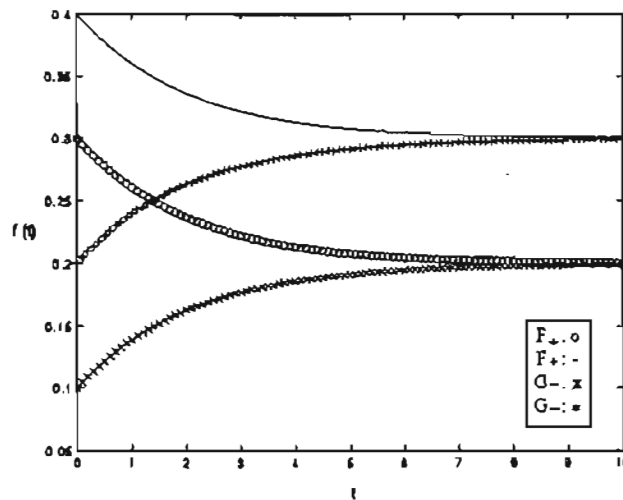


Figura 3-9: Evolución de las funciones F_+ (o), F_- (-), G_+ (*) y G_- (+) del modelo de Broadwell, con condiciones iniciales en $k_1 = 0.3$, $k_2 = 0.4$, $k_3 = 0.1$, $k_4 = 0.2$, tales que $k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = 1$.

Para concluir esta sección, cabe mencionar que en este modelo se conservan la masa, el momento y la energía, por construcción. Lo anterior resulta ser consistente al calcular los totales de la masa, el momento y la energía con las soluciones obtenidas. Considerando que el número

de partículas está normalizado, lo que se obtiene es:

$$\sum_i f_i = F_+ + F_- + G_+ + G_- = 1, \quad (3.98)$$

$$P_{total} = \sum_i v_i f_i = F_+ - F_- + G_+ - G_- = k_1 - k_2 + k_3 - k_4, \quad (3.99)$$

y

$$E_{total} = \sum_i v_i^2 f_i = F_+ + F_- + G_+ + G_- = 1; \quad (3.100)$$

y ya que ninguna de las tres expresiones depende del tiempo, se cumple que las tres son cantidades conservadas. Sin embargo se ve que también para este modelo la conservación de masa y de energía no son independientes.

La función $H(t)$ de este caso y este modelo se calcula substituyendo las soluciones (3.90)-(3.93) en la expresión (3.14). Esta se muestra en la figura (3-10).

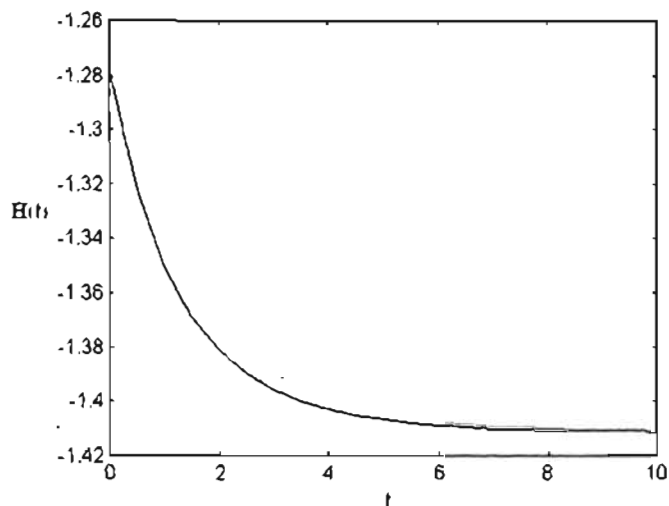


Figura 3-10: Función $H(t)$ para el caso homogéneo del modelo de Broadwell.

3.3.2. Caso general

Al igual que en los casos de Carleman y McKean, no se hallaron soluciones analíticas para condiciones iniciales arbitrarias del modelo de Broadwell. El análisis del caso homogéneo, sirve

para suponer que en el caso de partir de condiciones iniciales arbitrarias, las funciones de distribución deben de evolucionar hacia un estado de equilibrio, pero no da da ningún indicio de en qué forma lo hace. Al igual que en los otros modelos, es necesario un análisis numérico para averiguar cómo es la evolución temporal de las funciones de distribución para condiciones iniciales arbitrarias.

Cabe mencionar que este modelo se ha estudiado ampliamente y que se han encontrado algunas soluciones por distintos métodos [26].

3.4. Un modelo simple con colisiones inelásticas.

Para cerrar este capítulo, se presenta un último modelo simple de la ecuación de Boltzmann construido dentro del presente trabajo y en el que se introducen colisiones inelásticas.

Antes de introducir propiamente el modelo, es necesario considerar cómo se modifica la ecuación de Boltzmann dadas las características de la dinámica que rige a una colisión inelástica.

En la ecuación de Boltzmann, como se mostró en la sección 2.1.2 del capítulo anterior, la hipótesis sobre la elasticidad de las colisiones fué tomada en cuenta al momento de calcular el término de colisiones, $(\partial_t f)_{col} = J^+ - J^-$, ya que este hecho permite expresar a los términos de pérdida y ganancia de la siguiente manera

$$J^- = \int d\vec{v}_1 \int_0^\sigma db \int_0^{2\pi} d\phi b |\vec{g}| (f f_1), \quad (3.101)$$

y

$$J^+ = \int d\vec{v}'_1 \int_0^\sigma db' \int_0^{2\pi} d\phi b' |\vec{g}'| (f' f'_1). \quad (3.102)$$

Debido a que los parámetros de impacto son iguales para las colisiones directa y restitutiva, por el carácter central del potencial y a que $|\vec{g}'| = |\vec{g}|$ y $d\vec{v}' d\vec{v}'_1 = d\vec{v} d\vec{v}_1$, por tratarse de una colisión elástica, se obtiene que

$$(\partial_t f)_{col} = J^+ - J^- = \int d\vec{v}_1 \int_0^\sigma db \int_0^{2\pi} d\phi b |\vec{g}| [f' f'_1 - f f_1]. \quad (3.103)$$

Sin embargo, si la colisión es inelástica $|\vec{g}'| \neq |\vec{g}|$ y $d\vec{v}' d\vec{v}'_1 \neq d\vec{v} d\vec{v}_1$ y se debe calcular el término de colisiones adecuado.

El carácter elástico o inelástico de una colisión se puede establecer mediante el valor del coeficiente de restitución e , definido como

$$e \equiv \frac{|\vec{g}|_{final}}{|\vec{g}|_{inicial}} \quad (3.104)$$

donde $|\vec{g}|_{final}$ es el módulo de la velocidad relativa posterior a colisión y $|\vec{g}|_{inicial}$ el módulo de la velocidad relativa previa a la colisión y, por definición, $0 \leq e \leq 1$. De esta manera, si se interpreta a la cantidad $1 - e$ como una medida de la energía disipada en la colisión, $e = 1$ corresponde a una colisión elástica, mientras que para una completamente inelástica $e = 0$.

Estrictamente, el coeficiente de restitución está definido para cada colisión mediante la ecuación (3.104). Sin embargo, para evitar esta dificultad, se puede suponer que el coeficiente e es una constante característica de las moléculas de la misma especie. En este sentido, el coeficiente de restitución es el parámetro que determina cual será la $|\vec{g}|_{final}$ para cada $|\vec{g}|_{inicial}$, dada en una colisión del mismo tipo de moléculas.

De la definición de e se puede obtener una relación entre las velocidades características de la colisión. Si ésta es elástica, como ya se mencionó, se obtiene que $|\vec{g}'| = |\vec{g}|$ tanto para la colisión directa como para la restitutiva. Sin embargo, para colisiones inelásticas la relación que se obtiene es $|\vec{g}'| = e|\vec{g}|$ si la colisión es directa y $|\vec{g}| = e|\vec{g}'|$ si es restitutiva. Vale la pena recalcar que la razón por la cual la relación entre velocidades no es la misma para una colisión directa y para una restitutiva es que para la primera la velocidad inicial es $|\vec{g}|$ y la final es $|\vec{g}'|$, mientras que para la segunda la velocidad inicial es $|\vec{g}'|$ y la final es $|\vec{g}|$; lo mismo sucede si la colisión es elástica, pero dado que en ella $e = 1$ la relación entre velocidades para la colisión directa y para la restitutiva es la misma. El resto de la dinámica se mantiene igual si la colisión es elástica o inelástica; esto es, $b' = b$ debido al carácter central del potencial, independientemente del tipo de colisión.

Ahora bien, a partir de lo anterior y regresando a la ecuación (3.102), se tiene que $|\vec{g}'|$ corresponde al módulo de la velocidad relativa inicial de la colisión restitutiva; por lo tanto si la colisión es inelástica $|\vec{g}| = \frac{1}{e} |\vec{g}'|$. Además, se puede demostrar que siendo este el caso

$$d\vec{v}d\vec{v}' = \frac{1}{e} d\vec{v}d\vec{v}_1.$$

Substituyendo lo anterior en la ecuación (3.102) se obtiene que

$$J^+ = \int d\bar{v} \int_0^\sigma db' \int_0^{2\pi} d\phi b |\bar{g}| \left(\frac{1}{e^2} \right) (f' f'_1). \quad (3.105)$$

Con este resultado se obtiene que el nuevo término de colisiones, $(\partial_t f)_{inel}$, es

$$(\partial_t f)_{inel} = J^+ - J^- = \int d\bar{v}_1 \int_0^\sigma db \int_0^{2\pi} d\phi b |\bar{g}| \left[\left(\frac{1}{e^2} \right) f' f'_1 - f f_1 \right]. \quad (3.106)$$

La única diferencia respecto al término de colisiones original, ecuación (3.103), es el factor $\frac{1}{e^2}$ que aparece multiplicando a $f' f'_1$ y, por tanto, es la única modificación que sufre la ecuación de Boltzmann si las colisiones son inelásticas.

El sustento original para estudiar modelos simples reside en la complejidad intrínseca para determinar su evolución temporal. Evidentemente, esta dificultad prevalece en un modelo donde las colisiones son inelásticas y se espera que, por este mismo hecho, se incremente. En este sentido, como un primer acercamiento al estudio de la evolución de sistemas disipativos, es conveniente comenzar modificando un modelo ya estudiado y que éste sea lo más simple posible, como el de Mckean o el de Carleman, para extraer la mayor cantidad de información. El presente trabajo pretende construir, en función de esta información, una base inductiva para poder modelar la dinámica de sistemas disipativos mucho más complejos, como se espera que suceda para un medio granulado.

Es importante notar que en este tipo de modelos simples el hecho de que existan o no cantidades conservadas puede ser independiente de la naturaleza de las colisiones. Ya se vió que la hipótesis sobre el carácter elástico o inelástico de las colisiones está contenida solamente en el término de colisiones de la ecuación de Boltzmann. Aun así, puede ocurrir lo que se observa tanto en el modelo de Carleman como en el de Mckean, en donde el momento lineal no se conserva debido a la dinámica impuesta, independientemente del carácter de las colisiones.

Lo primero que se tomó en cuenta para construir un modelo simple con colisiones inelásticas fue, precisamente, que la dinámica impuesta permitiera la conservación del momento total pero no de la energía. El modelo de Mckean se puede modificar, como se muestra más adelante, de manera que se satisfagan estas condiciones. Por esta razón, el modelo que aquí se presenta se construyó tomando como punto de partida al modelo de Mckean.

Recordando que el modelo de Mckean es unidimensional y que sólo permite velocidades $v = +1$ o $v = -1$; lo que se hizo en el nuevo modelo contemplar el carácter inelástico fue permitir otra velocidad, $v = 0$. Así, en cada colisión se pierden dos unidades de energía. Sin embargo, al pedir que se pierda energía en cada colisión pero que se conserve el momento total, hay sólo algunas colisiones permitidas. La colisión entre una partícula que se mueve y otra que está parada no se permite porque no conserva el momento total y, por tanto, las únicas posibles son aquellas entre partículas con velocidades 1 y -1 . Éstas se muestran en la figura (3-11).

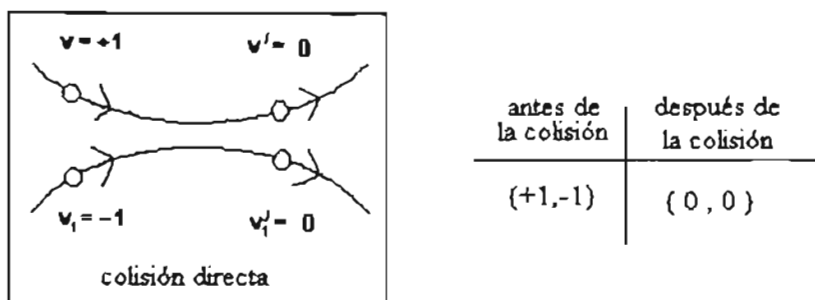


Figura 3-11: Dinámica de las únicas colisiones permitidas en el modelo modificado.

En concreto, este es un modelo unidimensional que admite sólo las velocidades $v = +1$, $v = -1$ y $v = 0$ y cuya variable espacial x es continua en el intervalo $(-\infty, \infty)$. El número de partículas correspondiente a las velocidades $1, -1$ y 0 se denota por $f_+(x, t) dx$, $f_-(x, t) dx$ y $f_0(x, t) dx$ respectivamente. A partir de la dinámica impuesta, esquematizada en la figura (3-11) la evolución de las funciones de distribución de este modelo simple, en ausencia de fuerzas externas, está gobernada por las ecuaciones

$$(\partial_t + \partial_x) f_+ = -\nu(f_+)(f_-), \quad (3.107)$$

$$(\partial_t - \partial_x) f_- = -\nu(f_+)(f_-), \quad (3.108)$$

y

$$\partial_t f_0 = 2 \left(\frac{\nu}{c^2} \right) (f_+)(f_-); \quad (3.109)$$

con las siguientes condiciones impuestas sobre la función de distribución total

$$f_{total}(x, t) = f_+(x, t) + f_-(x, t) + f_0(x, t),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(x, t) dx = 1, \quad (3.110)$$

$$f_{total}(x, 0) = g_0(x), \quad (3.111)$$

y

$$f_{total}(x, t) \rightarrow 0 \text{ si } x \rightarrow \pm\infty. \quad (3.112)$$

Una característica particular de la dinámica de este modelo es que no considera la colisión que restituye partículas con velocidades 1 ó -1, ni la colisión en la que se pierden partículas con velocidad 0. Al estar permitidas sólo las velocidades $v = +1$, $v = -1$ y $v = 0$, no existen partículas con velocidades más altas que al chocar se “enfrien” ni una fuerza externa que “caliente” a las partículas paradas. Lo anterior se refleja en las ecuaciones (3.107) y (3.108) donde sólo existe el término pérdida, mientras que en la ecuación (3.109) sólo existe el término de ganancia.

3.4.1. Caso homogéneo

Para funciones de distribución homogéneas las ecuaciones de evolución, en ausencia de fuerzas externas, son

$$\dot{f}_+ = -(f_+)(f_-), \quad (3.113)$$

$$\dot{f}_- = -(f_+)(f_-), \quad (3.114)$$

y

$$\dot{f}_0 = \frac{2}{e^2}(f_+)(f_-); \quad (3.115)$$

donde el punto representa la diferenciación respectoa νt y, por tanto, las ecuaciones son adimensionales. Resulta conveniente definir una nueva función $f \equiv e^2 f_0$, de tal manera que las

ecuaciones (3.113), (3.114) y (3.115) se puede reescribir como

$$\dot{f}_+ = -(f_+)(f_-), \quad (3.116)$$

$$\dot{f}_- = -(f_+)(f_-), \quad (3.117)$$

y

$$\dot{f} = 2(f_+)(f_-). \quad (3.118)$$

Las condiciones impuestas sobre la condición de distribución total correspondiente,

$$f_{total}(t) = f_+(t) + f_-(t) + f(t),$$

son las mismas ecuaciones (3.110), (3.111) y (3.112)), las cuales se satisfacen solo si $f \equiv e^2(f_0)$.

Para resolver las ecuaciones (3.116)-(3.118), es necesario desacoplarlas. Combinándolas se obtiene que

$$\frac{d}{dt}(f_+ - f_-) = 0 \Rightarrow f_+ - f_- = c_1, \quad (3.119)$$

$$\frac{d}{dt}(2f_+ + f) = 0 \Rightarrow 2f_+ + f = c_2, \quad (3.120)$$

y

$$\frac{d}{dt}(2f_- + f) = 0 \Rightarrow 2f_- + f = c_3, \quad (3.121)$$

donde c_1 , c_2 y c_3 son constantes.

Por otra parte, si $f_+(0) = k_1$, $f_-(0) = k_2$ y $f(0) = k_3$ son las condiciones iniciales, con k_1 , k_2 y k_3 constantes tales que $0 \leq k_i \leq 1$ para $i = 1, 2, 3$; de la ecuación (3.110) se obtiene que

$$k_1 + k_2 + k_3 = 1$$

en $t = 0$.

Ya que las ecuaciones (3.119)-(3.121) son válidas para todo t y en particular para $t = 0$, se

obtiene la relación entre las constantes c_i y las constantes k_i ; a saber:

$$k_1 - k_2 = c_1, \quad (3.122)$$

$$2k_1 + k_3 = c_2, \quad (3.123)$$

y

$$2k_2 + k_3 = c_3. \quad (3.124)$$

La combinación de las ecuaciones (3.119)-(3.121) permite escribir a f_+ , f_- o f en función de una de ellas más una combinación lineal de las condiciones iniciales. Por ejemplo, en términos de f_+ , se tiene que

$$f_- = f_+ + k_2 - k_1, \quad (3.125)$$

y

$$f = f_+ + 2k_1 + k_3. \quad (3.126)$$

Lo anterior permite desacoplar las ecuaciones. Utilizando (3.125), la ecuación (3.113) se transforma en la siguiente ecuación no lineal de primer orden para f_+ :

$$\dot{f}_+ = -f_+^2 + (k_1 - k_2) f_+, \quad (3.127)$$

cuya solución se obtiene inmediatamente como se muestra a continuación. Separando las variables en (3.127) se tiene que

$$\frac{df_+}{f_+ [(k_1 - k_2) - f_+]} = dt. \quad (3.128)$$

Esta expresión, utilizando fracciones parciales, se puede escribir como

$$\left(\frac{1}{f_+} + \frac{1}{[(k_1 - k_2) - f_+]} \right) df_+ = (k_1 - k_2) dt, \quad (3.129)$$

de donde se obtiene directamente la solución de f_+ integrando de ambos lados. De aquí que

$$f_+(t) = \frac{k_1 - k_2}{1 - \left(\frac{k_2}{k_1}\right) e^{-(k_1 - k_2)t}}. \quad (3.130)$$

A partir de esta solución y de las ecuaciones (3.125) y (3.126), se calculan las dos soluciones restantes. Estas son

$$f_-(t) = \frac{k_1 - k_2}{1 - \left(\frac{k_2}{k_1}\right) e^{-(k_1 - k_2)t}} + k_1 - k_2 \quad (3.131)$$

y

$$f(t) = \frac{2(k_1 - k_2)}{1 - \left(\frac{k_2}{k_1}\right) e^{-(k_1 - k_2)t}} + 2k_1 + k_3. \quad (3.132)$$

Se puede demostrar directamente que las ecuaciones (3.130), (3.131) y (3.132) recuperan las condiciones iniciales en $t = 0$, que satisfacen para todo t la condición de normalización (3.110) y que se cumple que $0 \leq f_+, f_-, f \leq 1$ para todo tiempo; por lo tanto son soluciones válidas de las ecuaciones de Boltzmann correspondientes. Así mismo, se puede observar que con estas soluciones la masa y el momento total se conservan:

$$\sum_i f_i = f_+ + f_- + f = k_1 + k_2 + k_3 = 1, \quad (3.133)$$

y

$$P_{total} = \sum_i v_i f_i = f_+ - f_- = -(k_2 - k_1); \quad (3.134)$$

mientras que la energía total no:

$$E_{total} = \sum_i v_i^2 f_i = \frac{2(k_1 - k_2)}{1 - \left(\frac{k_2}{k_1}\right) e^{-(k_1 - k_2)t}} + k_1 - k_2, \quad (3.135)$$

ya que depende del tiempo. Lo anterior resulta ser consistente respecto al carácter inelástico del modelo.

En la figura (3-12) se muestra, para determinadas condiciones iniciales, la evolución de las ecuaciones (3.130)-(3.132) hacia un estado de equilibrio. En estas gráficas se refleja satisfactoriamente el carácter disipativo del sistema ya que se observa cómo se va "enfriando". Se ve que f crece debido a que las partículas con velocidad $v = 1$ y $v = -1$ al colisionar se van parando. Las funciones f y f_+ alcanzan un determinado valor porque, a partir de cierto t , las partículas con velocidad $v = 1$ no tienen partículas con velocidad $v = -1$ con quién colisionar.

La función $H(t)$ de este caso y este modelo se calcula substituyendo las soluciones (3.130)-

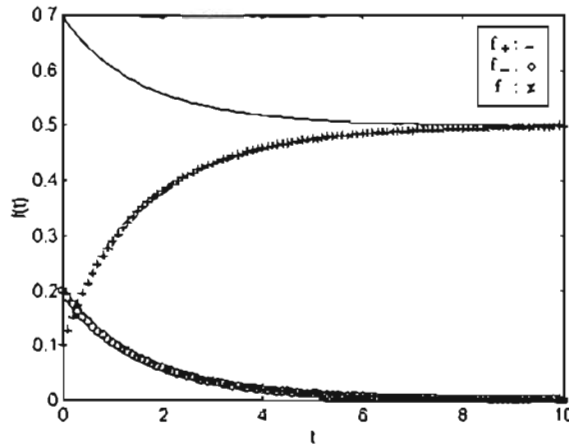


Figura 3-12: Evolución al equilibrio de las funciones de distribución f_+ (-), f_- (o) y $f(x)$ partiendo de las condiciones iniciales $k_1 = 0.7$, $k_2 = 0.2$ y $k_3 = 0.1$, de manera que $k_1 + k_2 + k_3 = 1$.

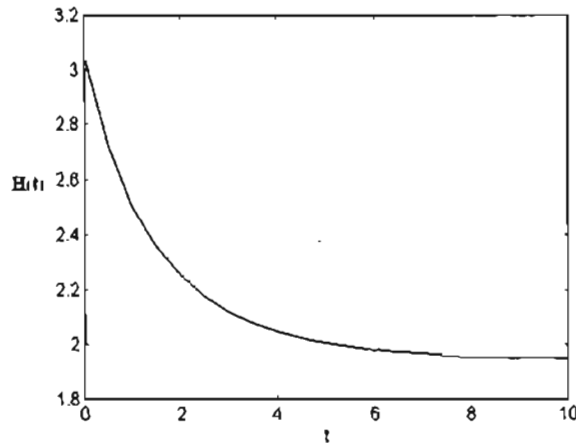


Figura 3-13: Función $H(t)$ para el caso homogéneo del modelo que considera colisiones inelásticas.

(3.132) en la expresión (3.14). Esta se muestra en la figura (3-13). Cabe resaltar que los valores de $H(t)$ en este caso son positivos, a diferencia de lo que sucede en los otros tres modelos.

3.4.2. Caso general

Como en los casos anteriores, no fué posible hallar soluciones analíticas para condiciones iniciales generales. Al igual que para los otros modelos, se requiere de una solución numérica para averiguar los detalles de la evolución temporal de las funciones de distribución.

Como conclusión del capítulo, a partir del estudio efectuado sobre estos modelos simples, se puede mostrar que los sistemas descritos evolucionan hacia un estado de equilibrio si parten de una condición homogénea, pero no se puede decir nada de cómo lo hacen si parten de condiciones iniciales arbitrarias.

Para estudiar el comportamiento y la evolución de la función de distribución de este tipo de modelos para condiciones iniciales arbitrarias, se pueden hacer simulaciones numéricas. En el Capítulo 4 se muestran dos simulaciones del modelo de McKean y algunos resultados preliminares obtenidos a partir de ellas. Estas simulaciones se diseñaron con la finalidad de generar una herramienta numérica que se pueda extender para simular la dinámica de sistemas más complejos, de donde se pueda extraer ecuaciones de evolución del sistema.

Capítulo 4

Simulaciones numéricas del modelo de Mckean

En el capítulo anterior se presentaron cuatro modelos simples de la ecuación de Boltzmann y una primera inspección sobre su evolución. Para completar estos estudios y comprender con mayor detalle su evolución partiendo de cualquier condición inicial, se recurrió a una herramienta numérica. En este capítulo se presentan dos simulaciones numéricas de la evolución de un sistema bajo la dinámica del modelo de Mckean y algunos resultados preliminares obtenidos a partir de ellos. Las rutinas numéricas fueron programadas en el ambiente de Matlab y se muestran en el Apéndice A de este trabajo.

La primera simulación consiste en una discretización de la ecuación de Boltzmann para el modelo de Mckean. Al considerar el tiempo y el espacio como variables discretas, la ecuación de Boltzmann se puede escribir como un ecuación en diferencias finitas. La evolución de una cierta condición inicial se determina calculando, en cada paso temporal, el siguiente estado del sistema en términos del anterior. Para ello se usa la ecuación en diferencias finitas.

La segunda simulación es un átómata celular. Este tipo de simulación consiste básicamente en una regla de evolución temporal sobre un conjunto discreto; es decir, dado un punto de este conjunto, se presenta una regla que le asocia otro punto del mismo [31]. En simulaciones de sistemas físicos dicho conjunto puede representar una configuración espacial de ciertos elementos, mientras que la regla de evolución temporal puede representar algún tipo de interacción

entre ellos. En este caso, el autómata simula un sistema de partículas que se mueven en una red discreta unidimensional, con velocidades $v = +1$ y $v = -1$ y que chocan entre sí conforme lo establece la dinámica de Mckean. La configuración espacial representa el número de ocupación de partículas con $v = +1$ y con $v = -1$ en cada posición de la red, mientras que la regla de evolución temporal está conformada por una regla que reproduce el movimiento y otra que reproduce las colisiones entre partículas.

La comparación entre estas dos simulaciones resulta de interés porque sirve para observar las similitudes y diferencias entre la evolución "real" de un sistema bajo la dinámica de Mckean y la evolución bajo las hipótesis de la Teoría Cinética. En el enunciado anterior la palabra real aparece entrecomillada porque el modelo de Mckean, por construcción, carece de significado físico. En este sentido, no hay un sistema real que sirva como referencia; sin embargo, si hay una diferencia entre simular el comportamiento hipotético de un sistema bajo la dinámica de Mckean y hacer una predicción sobre dicho comportamiento desde una teoría, en este caso la Teoría Cinética. La diferencia existe dado el conjunto de hipótesis que están consideradas en la ecuación de Boltzmann, que es la herramienta para predecir la evolución del sistema desde la Teoría Cinética.

Esta comparación puede resultar útil para establecer bajo que condiciones es válido diseñar autómatas celulares de sistemas complejos, como un medio granular, manteniendo ciertas características esenciales de un modelo de la ecuación de Boltzmann. La idea de preservar las características de un modelo cinético tiene que ver con la posibilidad de formular una ecuación tipo Boltzmann del modelo y a partir de ella obtener ecuaciones de conservación.

4.1. Consideraciones generales

Con el fin de comparar las dos simulaciones numéricas del modelo de Mckean, se contemplaron algunas características comunes en el arreglo espacial, las condiciones de frontera y las condiciones iniciales.

El arreglo espacial consiste en una red discreta unidimensional de J sitios espaciados uniformemente, de manera que el contador entero j , tal que $j = 0, 1, \dots, J$, denota la posición en esta red. Las condiciones a la frontera se suponen periódicas, por lo que el sitio $j = -1$

es el mismo que $j = J$ y el sitio $j = J + 1$ es el mismo que $j = 0$; es decir, el arreglo es un anillo unidimensional. La variable temporal también es discreta y se denota por n , tal que $n = 0, 1, \dots, N$.

Dado que en las dos simulaciones numéricas se discretizan las variables x y t , se usa una notación distinta para las funciones de distribución, de forma que u_j^n ó $u(j, n)$ se usará indistintamente como el equivalente discreto de $f_+(x, t)$ y v_j^n ó $v(j, n)$ como el de $f_-(x, t)$.

En ambas simulaciones se pueden generar tres tipos distintos de condiciones iniciales; a saber, uno en el que funciones u_j^0 y v_j^0 son homogéneas, otro en el que son distribuciones normales respecto a una posición determinada en el anillo y el último en la que dichas funciones se generan calculando un número al azar para cada j .

Las condiciones iniciales homogéneas sirven como instrumento de verificación ya que en ese caso se conoce la solución analítica de la ecuación de Boltzmann correspondiente. Estas se generan fácilmente definiendo un valores para u_j^0 y v_j^0 de manera que

$$u_j^0 = u_{j+1}^0 \quad y \quad v_j^0 = v_{j+1}^0 \quad (4.1)$$

y

$$\sum_j (u_j^0 + v_j^0) = 1. \quad (4.2)$$

En el inciso (a) de la figura (4-1) se muestra un ejemplo de condición inicial de este tipo y en ella se observa claramente que u_j^0 y v_j^0 no dependen de la posición.

Cuando las condiciones iniciales son distribuciones normales, cada una de las funciones u_j^0 y v_j^0 tiene un máximo centrado en una posición dada del anillo, que corresponde a su media, y pueden estar más o menos concentradas alrededor de ese sitio (dependiendo de un valor respectivo de desviación estándar). Para generarlas, en este caso, se considera un porcentaje inicial de ocupación para cada tipo de partícula y después se distribuye normalmente, con sus parámetros correspondientes, a lo largo del anillo. De esta forma se satisface la condición (4.2). En el inciso (b) de la figura (4-1) se muestra un ejemplo de este tipo de condiciones iniciales.

En el último tipo de condiciones iniciales, el valor de u_j^0 y v_j^0 para cada j se genera distribuyendo aleatoriamente en j ciertos porcentajes de partículas de cada tipo, inicialmente definidos, de tal forma que se satisfaga la condición (4.2). Un ejemplo de este tipo de condición

se muestra en el inciso (c) de la figura (4-1).

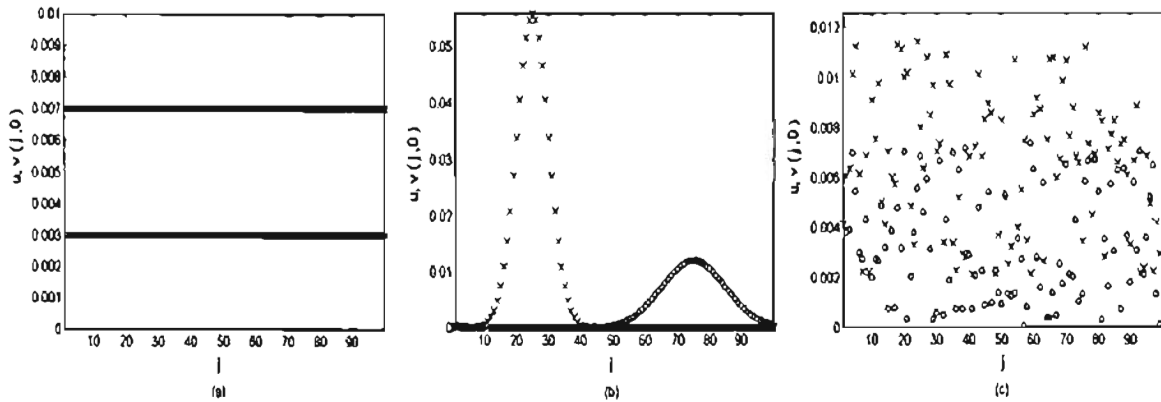


Figura 4-1: Ejemplo de tipo de condición inicial generada para un sistema de $J = 100$. Los valores de u_j^0 (x) y v_j^0 (o) son tales que la suma sobre j de $u_j^0 + v_j^0$ es igual a 1. En (a) se muestran las condiciones homogéneas $u_j^0 = 0.07$ y $v_j^0 = 0.03$ para toda j . En (b) u_j^0 y v_j^0 son distribuciones normales. En este caso 70 % tiene velocidad $v = +1$ y están distribuidas alrededor de la media $\mu_u = 25$ con una desviación estándar $\sigma_u = 5$. El otro 30 % tiene velocidad $v = -1$ y están distribuidas alrededor de $\mu_v = 75$ con $\sigma_v = 10$. En (c) u_j^0 y v_j^0 se generan al azar para cada j , tal que la suma de los j valores de u_j^0 es igual a 0.7 y la de v_j^0 es igual 0.3.

4.2. La primera simulación

En la primera simulación las ecuaciones de Boltzmann del modelo de Mckean se escriben en diferencias finitas, de manera que se calcula el valor de las funciones de distribución para el siguiente tiempo en términos del valor al tiempo anterior. Así, se puede seguir la evolución de un sistema que parte de determinadas condiciones iniciales.

Las consideraciones sobre el arreglo espacial, las condiciones de frontera y las condiciones iniciales ya fueron mencionadas; por lo que resta comentar cómo se discretizaron las ecuaciones de Boltzmann del modelo de Mckean. Estas, en ausencia de fuerzas externas, son:

$$(\partial_t + \partial_x) f_+ = [f_-^2 - f_+ f_-], \quad (4.3)$$

y

$$(\partial_t - \partial_x) f_- = [f_+ f_- - f_-^2], \quad (4.4)$$

con las siguientes condiciones impuestas sobre la función de distribución total

$$f_{total}(x, t) dx = f_+(x, t) dx + f_-(x, t) dx :$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{total}(x, t) dx = 1, \quad (4.5)$$

$$f_{total}(x, 0) dx = f_0(x), \quad (4.6)$$

y

$$f_{total}(x, t) \rightarrow 0 \quad \text{si } x \rightarrow \pm\infty. \quad (4.7)$$

Para discretizar estas ecuaciones diferenciales parciales se usó el método de Euler [34]. Con dicho método las variables continuas (x, t) se transforman en las variables discretas (x_j, t_n) tal que

$$x_j = x_0 + j\Delta x \quad \text{para } j = 0, 1, \dots, J$$

y

$$t_n = t_0 + n\Delta t \quad \text{para } n = 0, 1, \dots, N;$$

donde Δx y Δt son los tamaños de los pasos correspondientes a cada variable. Las únicas condiciones que se necesita imponer sobre Δx y Δt es que su cociente sea igual a la unidad y que $\Delta x, \Delta t < 1$ para poder despreciar términos de segundo orden en los desarrollos en serie. Las funciones de distribución se transforman como

$$f_+(x, t) \rightarrow u(x_j, t_n) \equiv u_j^n, \quad (4.8)$$

y

$$f_-(x, t) \rightarrow v(x_j, t_n) \equiv v_j^n. \quad (4.9)$$

Las derivadas parciales respecto a t y respecto a x se convierten en diferencias finitas bajo

la siguiente definición: para la función w_j^n , que representa a u_j^n o a v_j^n , se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_j^n) \equiv \frac{w_j^{n+1} - w_j^n}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (4.10)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial x} (w_j^n) \equiv \frac{w_{j+1}^n - w_{j-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (4.11)$$

donde $O(\Delta t)$ y $O(\Delta x^2)$ se refieren a términos de mayor orden. Este desarrollo es válido sólo si $\Delta x, \Delta t < 1$, razón por la cual se impone esta condición sobre el tamaño de los pasos. Siendo este el caso, los términos de mayor orden pueden despreciarse.

Con estas definiciones, las expresiones (4.3) y (4.4) se convierten en las siguientes ecuaciones adimensionales en diferencias finitas:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^n - u_j^n) + \Delta t \left[(v_j^n)^2 - u_j^n v_j^n \right], \quad (4.12)$$

y

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_{j+1}^n - v_j^n) + \Delta t \left[u_j^n v_j^n - (v_j^n)^2 \right]. \quad (4.13)$$

Para ser consistentes con el hecho de que $v = \pm 1$, $\Delta x/\Delta t$ debe ser igual a uno (el signo de la velocidad ya está considerado en las propias ecuaciones). Esto se traduce en que durante un paso temporal sólo puede suceder un paso espacial.

Dada la dinámica de Mckean, si $v_j^n = 0$ entonces

$$u_j^{n+1} = u_j^n,$$

y

$$v_j^{n+1} = 0,$$

para toda j . Esto se debe a que las partículas con velocidad positiva en dicho modelo no interactúan entre sí, por lo que sólo se mueven. Sin embargo, si se sustituye $v_j^n = 0$ en las ecuaciones (4.12) y (4.13), después de simplificar, se obtiene que

$$u_j^{n+1} = 2u_j^n - u_{j+1}^n,$$

y

$$v_j^{n+1} = 0;$$

que no corresponde a la dinámica impuesta en el modelo.

Para evitar esta inconsistencia, se introdujo un tipo de promedio espacial, llamado Criterio de Lax [34], el cual establece que se puede remplazar cualquiera de los términos w_j^n por el promedio $\frac{1}{2} (w_{j+1}^n + w_{j-1}^n)$.

Bajo este criterio, las ecuaciones (4.12) y (4.13) se transforman en

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \nu \Delta t [(v_j^n)^2 - u_j^n v_j^n], \quad (4.14)$$

y

$$v_j^{n+1} = \frac{1}{2} (v_{j+1}^n + v_{j-1}^n) + \frac{\Delta t}{2\Delta x} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) + \nu \Delta t [u_j^n v_j^n - (v_j^n)^2]; \quad (4.15)$$

de donde se pueden obtener los valores de u_j^{n+1} y v_j^{n+1} para toda n y j en función de los valores iniciales u_j^0 y v_j^0 , y que son consistentes con la dinámica del modelo de Mckean.

Las condiciones equivalentes a (4.5), (4.6) y (4.7) que debe cumplir la función de distribución total discreta, $s_j^n \equiv u_j^n + v_j^n$, dado el arreglo espacial de un anillo unidimensional son:

$$\sum_{j=0}^J s_j^n = 1 \quad \text{para toda } n, \quad (4.16)$$

$$s_j^0 = s(x_j), \quad (4.17)$$

y

$$s_{j=J+1}^n = s_{j=0}^n \quad \text{o} \quad s_{j=-1}^n = s_{j=J}^n \quad \text{para toda } n. \quad (4.18)$$

Para observar la evolución del sistema se desarrolló un programa en el ambiente Matlab con el cual se iteran las ecuaciones(4.14) y (4.15) partiendo de las condiciones iniciales dadas. La rutina de dicho programa se muestra en el Apéndice A bajo el nombre de *sim1.m*.

A continuación se muestran ciertos resultados obtenidos con este simulación.

Resultados Para investigar la evolución de este tipo de sistemas, se observó: 1) si partiendo de cualquiera de las condiciones iniciales propuestas, el sistema evoluciona hasta alcanzar el

equilibrio , 2) si lo hace de manera independiente al tamaño del anillo y 3) la evolución de la función H para este modelo.

Lo primero que se hizo fue verificar que para condiciones iniciales homogéneas, la evolución de los sistemas coincidiera con la solución analítica mostrada en el capítulo anterior. También se comprobó que para todo tipo de condición inicial -homogéneas, de distribución normal o de sembrado al azar-, en el caso de tener sólo partículas con velocidad positiva, los sistemas evolucionaran de manera que las partículas sólo se movieran; ya que en el modelo de Mckean no hay interacción entre ellas.

Una vez comprobado lo anterior, se investigó propiamente la evolución de los sistemas. Se observó que independientemente de las condiciones iniciales y del tamaño del anillo (como se muestra con detalle más adelante), estos sistemas evolucionan hacia una situación de equilibrio de tal forma que las funciones discretas u_j^n y v_j^n se van homogeneizando espacialmente al mismo tiempo que tienden a un mismo valor, el cual correspondería a las maxwellianas del modelo.

En las siguiente figura se muestra un ejemplo de lo anterior para cada tipo de condición inicial; en donde el tamaño del anillo y los porcentajes iniciales de partículas con velocidad positiva y con velocidad negativa son los mismos para los tres tipos de condiciones iniciales.

En las gráficas mostradas en la figura (4-2) se puede observar que el sistema evoluciona a una situación de equilibrio en donde

$$u_j^n = v_j^n, \quad (4.19)$$

para toda j y partiendo de cualquiera de las tres condiciones iniciales propuestas.

Para verificar si el sistema alcanza un situación de equilibrio, se analizó la evolución en función del número de iteraciones de las siguientes tres cantidades:

- el valor medio respecto a j de las funciones de distribución , $\mu_u(n)$ y $\mu_v(n)$, para observar si tienden hacia las maxwellianas del modelo,
- la desviación estándar respecto a dicho valor medio, $\sigma_u(n)$ y $\sigma_v(n)$, para ver si se vuelven homogéneas, y
- la diferencia, en porcentaje, entre el valor medio en la iteración $n + 1$ y en la iteración n de cada función de distribución, $\Delta\mu_u(n + 1, n)$ y $\Delta\mu_v(n + 1, n)$, para ver si efectivamente

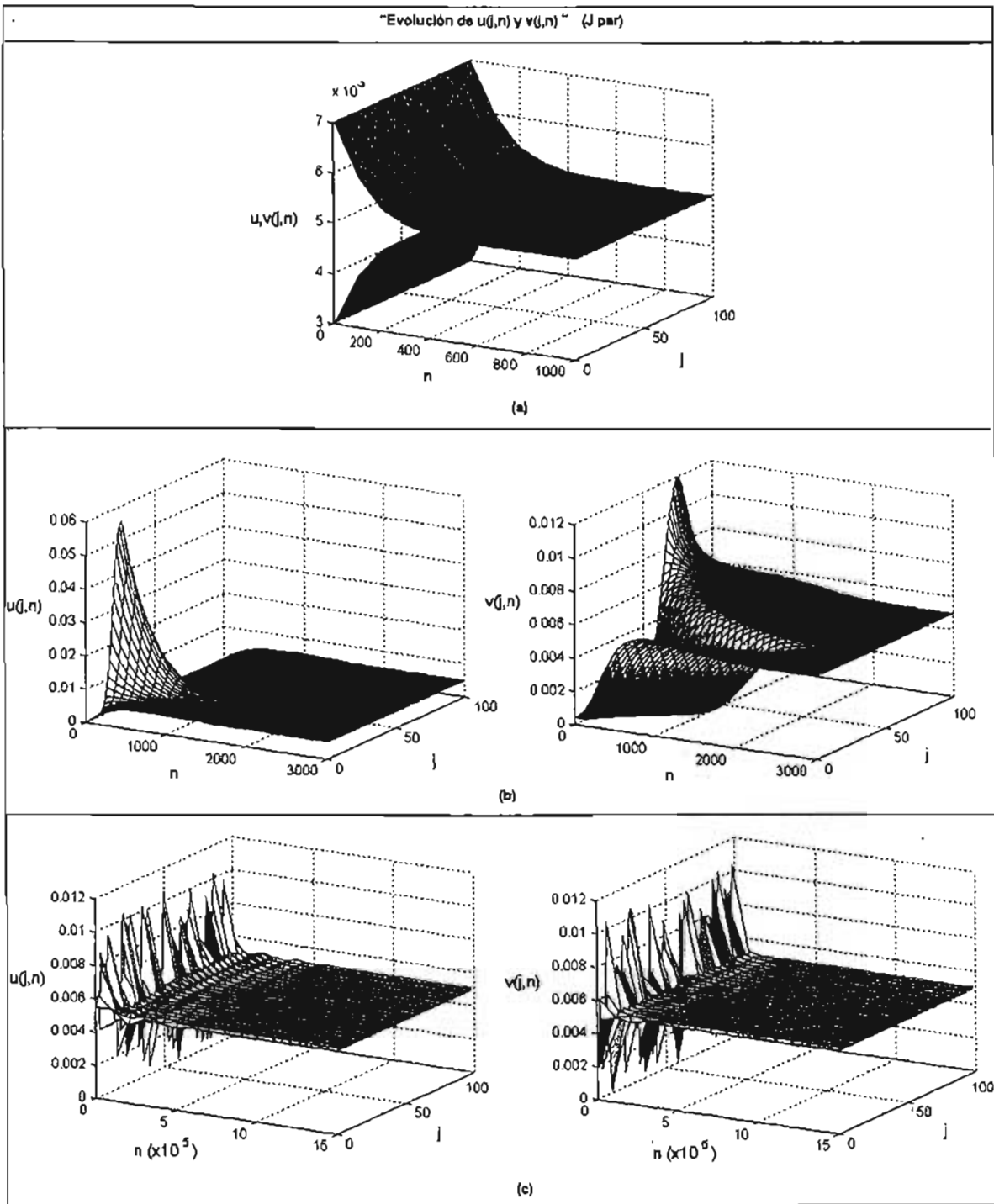


Figura 4-2: Evolución de las funciones u_j^n (o) y v_j^n (+) para las tres condiciones iniciales mostradas en la figura (4-1). Los datos que se muestran están tomados cada 100 iteraciones.

se llega a una situación de equilibrio.

En la figura (4-3) se muestran estos resultados para la evolución del sistema en los casos correspondientes a los incisos (a), (b) y (c) de la figura (4-2).

Cabe mencionar que σ está definida como

$$\sigma = \sqrt{\frac{n_m \sum x^2 - (\sum x)^2}{n_m^2}}, \quad (4.20)$$

donde n_m es el número total de valores de la muestra, que en este caso corresponde a J , y x los valores que conforman la muestra, en este caso u_j^n y v_j^n .

Estos resultados muestran que las funciones de distribución evolucionan de la forma esperada [20, 21], esto es:

1. los valores medios evolucionan hacia las maxwellianas del modelo, y
2. la desviación estándar de las funciones va disminuyendo, lo cual sugiere que las funciones se van homogeneizando conforme el número de iteraciones aumenta.

Sin embargo, en la gráfica (2) del inciso (b) de la figura(4-3), se observa que la desviación estándar de ambas funciones tiende hacia un valor constante diferente de cero. Este hecho se puede explicar si se observa una ampliación del inciso (c) de la figura(4-2), como se muestra en la figura(4-4). En ella se puede apreciar que las funciones de distribución discretas no acaban de homogeneizarse y tienden a tomar una forma periódica, de manera que

$$u_{j-1}^n = u_{j+1}^n, \quad (4.21)$$

o bien

$$v_{j-1}^n = v_{j+1}^n. \quad (4.22)$$

Analíticamente; si se consideran las condiciones dadas en las ecuaciones (4.19), (4.21) y (4.22) y se substituyen en las ecuaciones de evolución (4.14) y (4.15), se obtiene que

$$u_j^{n+1} = u_{j-1}^n, \quad (4.23)$$

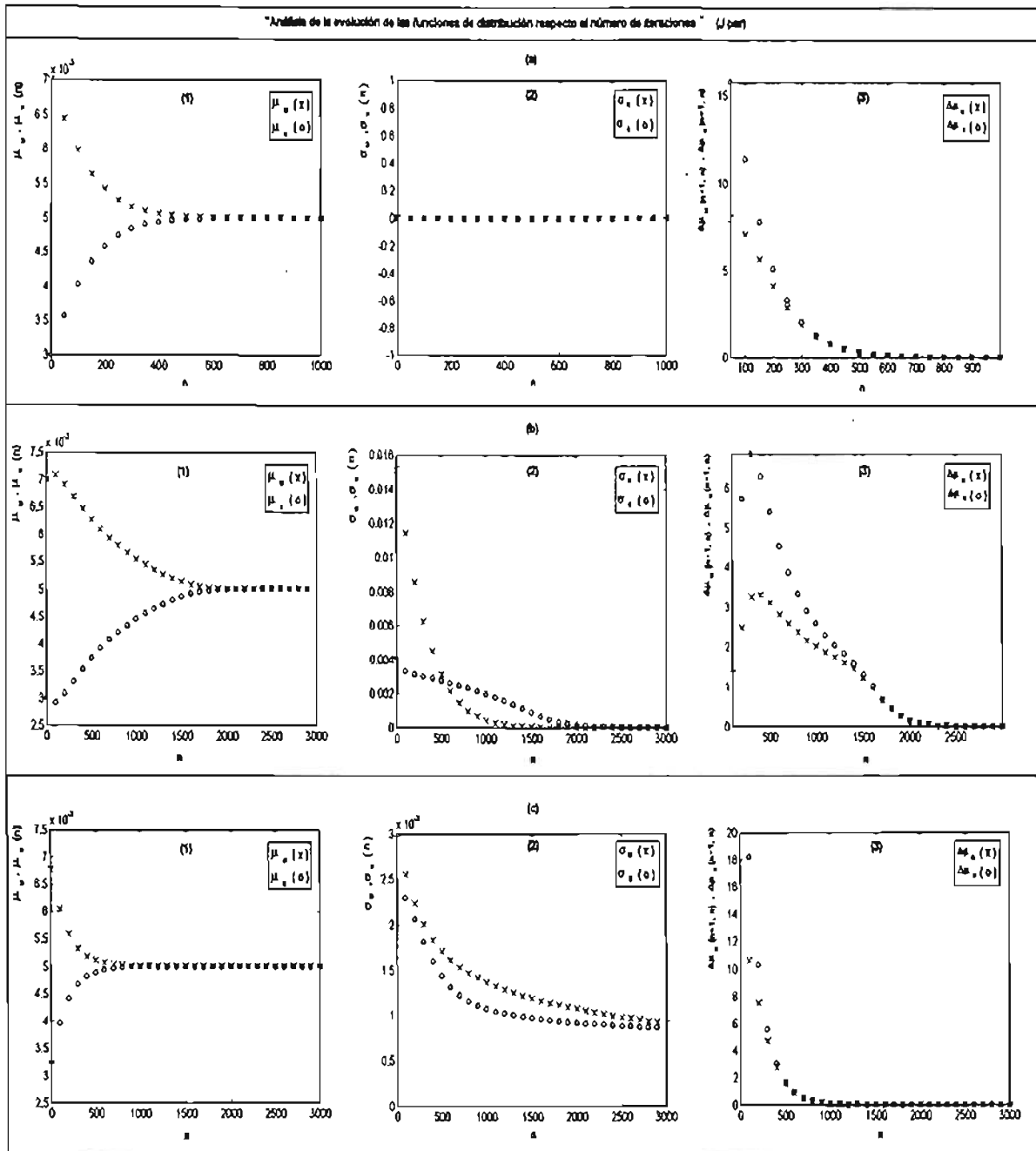


Figura 4-3: Análisis de la evolución de u_j^n y v_j^n para los tres casos mostrados en la figura (4-2). Se presentan como función de n : en (1) el valor medio $\mu_u(x)$ y $\mu_v(o)$ respecto a j de las funciones de distribución $u(j, n)$ y $v(j, n)$, en (2) la desviación estándar $\sigma_u(x)$ y $\sigma_v(o)$ respecto μ_u y μ_v y en (3) el porcentaje de $\Delta\mu_u(n+1, n)$ (x) y $\Delta\mu_v(n+1, n)$ (o).

y

$$v_j^{n+1} = v_{j+1}^n, \quad (4.24)$$

para toda j . Esto quiere decir que, cuando las funciones de distribución toman esta forma, se mantienen oscilando intermitentemente entre dos valores y por tanto son un tipo de solución de la ecuación de Boltzmann discretizada bajo todas las condiciones discutidas previamente.

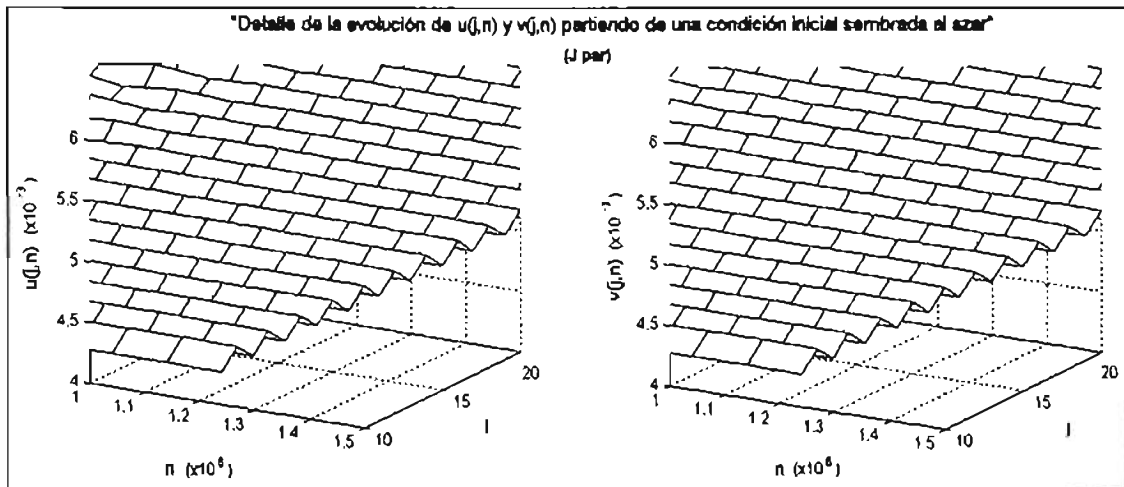


Figura 4-4: Detalle de la evolución de las funciones u_j^n y v_j^n , partiendo de una condición inicial generada al azar para cada j en un anillo de $J = 100$.

Estas soluciones sólo aparecen cuando las condiciones iniciales sembradas al azar y cuando el tamaño del anillo J es par, de forma que se puede satisfacer la periodicidad de las funciones en la frontera del sistema. Cuando J no es par, como en el ejemplo que se muestra en el inciso (i) de la figura (4-5), las funciones de distribución evolucionan homogeneizándose espacialmente e igualándose entre sí. En el inciso (ii) de la figura (4-5) se muestra un acercamiento de las gráficas mostradas en el inciso (i) y se puede ver que las funciones ya no tienden a funciones periódicas como las que aparecen cuando J es par. Esto se puede corroborar al observar en el inciso (iii) de la misma figura, el análisis de la evolución del sistema en estas circunstancias donde se aprecia en (b) que la desviación estándar tiende a cero. En este caso se cumple para toda j que

$$u_j^n = v_j^n, \quad (4.25)$$

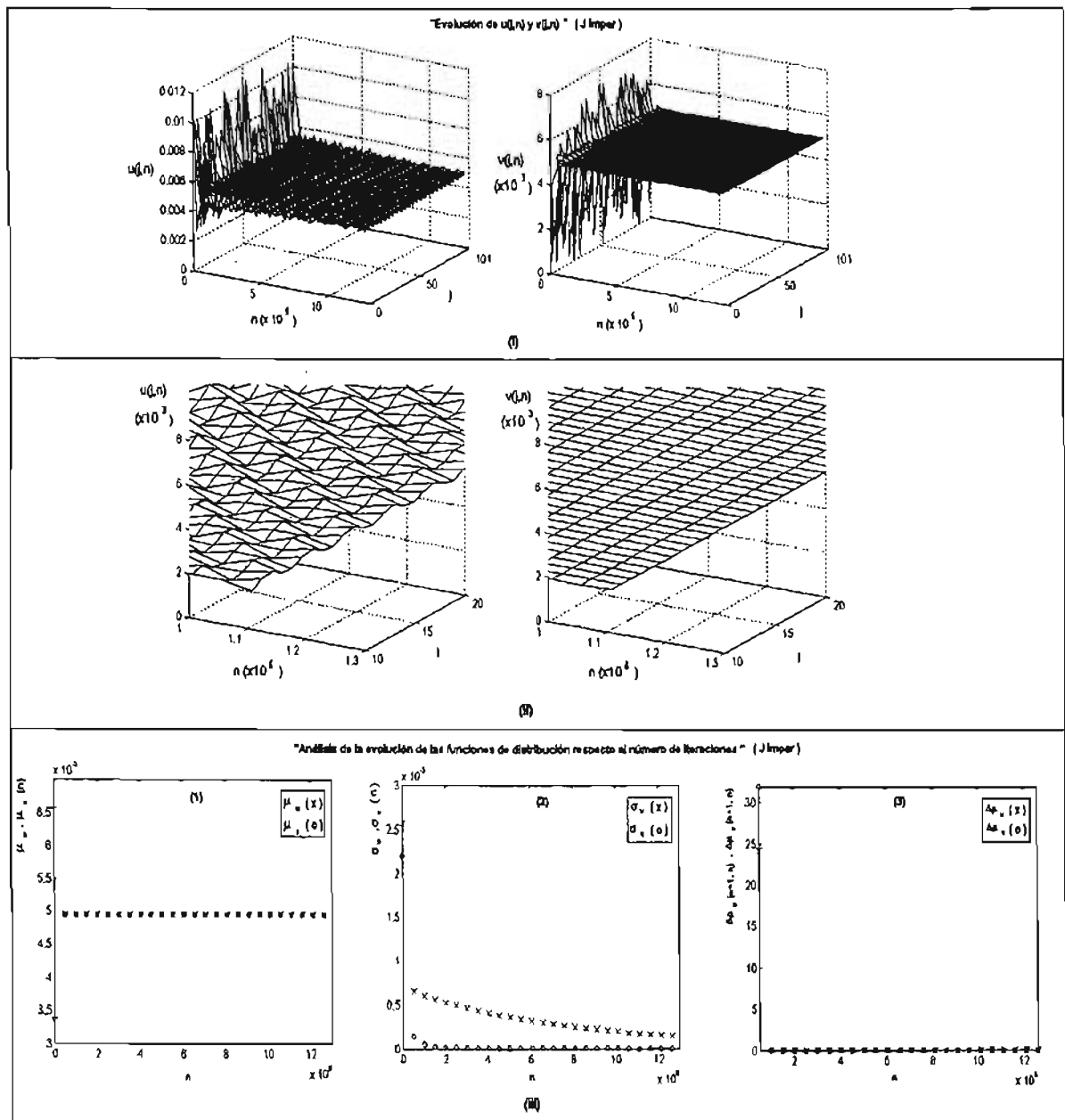


Figura 4-5: Se muestra para una condición inicial sembrada al azar para un sistema con de $J = 101$: en (i) la evolución de las funciones u_j^n y v_j^n (los datos están tomados cada 50500 iteraciones), en (ii) un detalle de dicha evolución y en el (iii) las mismas gráficas analizadas en la figura (4-3) correspondientes a este sistema.

y

$$u_j^n = u_{j+1}^n, \quad (4.26)$$

o bien

$$v_j^n = v_{j+1}^n. \quad (4.27)$$

Si se substituyen estas condiciones en las ecuaciones de evolución (4.14) y (4.15) también se obtienen las igualdades (4.23) y (4.24), de manera que el sistema se mantiene en equilibrio.

Una vez contemplado este aspecto, se analizó la relación entre el tiempo de relajación del sistema y

- i) el tipo de condición inicial,
- ii) el porcentaje inicial de partículas con velocidad positiva y negativa, y
- iii) el tamaño del anillo.

Para ello se determinó el número de iteraciones que tarda un sistema en alcanzar la condición de equilibrio, considerando cuatro distintos porcentajes iniciales de partículas con velocidad positiva, F_u , y con velocidad negativa, $F_v = 1 - F_u$, y cuatro diferentes tamaños de anillo J , respecto a cada uno de los tres tipos de condición inicial.

Para decidir en qué momento un sistema ya ha alcanzado una condición de equilibrio, se definió un criterio que consiste en evaluar en cada iteración qué tanto difiere cada función de distribución de las maxwellianas del modelo. Esto se realiza comparando las medias de las funciones de distribución y la media de la maxwelliana, así como la desviación estándar respecto a la media de las funciones de distribución con la propia media. Se estableció que si en n se satisface simultáneamente para u_j^n y v_j^n que: 1) la media de la funciones y la media de la maxwellina difieren en 0.1 % y 2) la desviación estándar de la funciones respecto a su media y la misma media difieren en 99.9%; el sistema ya alcanzó una situación de equilibrio o ya se relajó. A esta iteración se le denota como tiempo de relajación n_{rel} . Esta subrutina se encuentra dentro del programa *sim1.m* que se puede ver en el Apéndice A.

En la figura(4-6), se muestran los resultados obtenidos respecto a los tiempos de relajación. Es importante aclarar que los correspondientes a la condición inicial generada al azar se obtuvieron al promediar cinco realizaciones típicas.

En esta serie de gráficas se observa que el tiempo de relajación aumenta conforme el tamaño

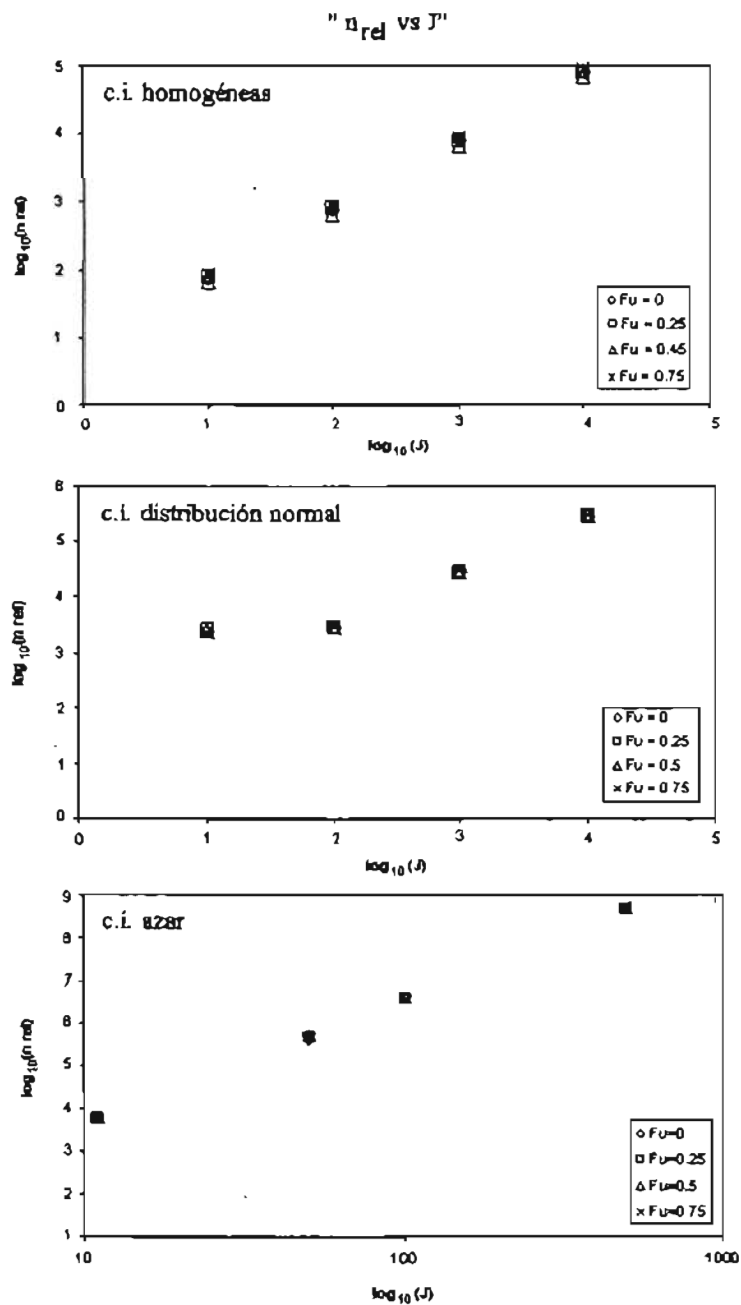


Figura 4-6: Se muestra, para cada tipo de condición inicial propuesta, el número de iteraciones en las que el sistema alcanza el equilibrio n_{rel} , en función del tamaño del anillo y de distintos porcentajes iniciales de partículas con velocidad positiva F_u . Se grafica el $\log_{10}(n_{rel})$ vs $\log_{10}(J)$ para ver las diferencias en orden de magnitud.

de sistema lo hace y que no depende significativamente del porcentaje inicial de partículas con velocidad positiva y con velocidad negativa. Además puede observarse que para cada tipo de condición inicial, los tiempos de relajación son mayores para los sistemas en los que inicialmente hay mucho más partículas de un tipo que del otro. Esto tiene sentido ya que para dichos sistemas se necesitan más colisiones, o iteraciones, para alcanzar una situación en donde haya el mismo número de partículas con $v = +1$ y $v = -1$. De estas gráficas puede inferirse que si $J \rightarrow \infty$ entonces $n_{rel} \rightarrow \infty$, independientemente de su relación funcional. Sin embargo, queda como un pendiente de este trabajo determinar y analizar dicha relación en función del tipo de condición inicial propuesta.

Para finalizar el análisis de esta simulación, resta mostrar la función H para los sistemas analizados. La definición de H para funciones de distribución no homogéneas es la misma que la que se muestra en la ecuación (2.42), pero dependiente de \vec{r} y de t , esto es

$$H(\vec{r}, t) \equiv \int d\vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t) \ln f(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (4.28)$$

En este caso, el Teorema H de Boltzmann establece que si la función de distribución f satisface la ecuación de Boltzmann, entonces

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} \leq 0, \quad (4.29)$$

tal que

$$\mathcal{H}(t) = \int_V d\vec{r} H(\vec{r}, t), \quad (4.30)$$

y donde V es el volumen total del sistema. Esta función monotónica decreciente alcanza su mínimo únicamente si f es la distribución de Maxwell-Boltzmann y después de alcanzarlo se vuelve constante, puesto que el término de colisiones de la ecuación de Boltzmann se anula. Esta función es la que puede considerarse para definir una generalización de la entropía en este caso ([16]).

Con base en la definición (4.28), se pueden calcular las funciones discretas $H(j, n)$ y $\mathcal{H}(n)$ como

$$H(j, n) = u_j^n \ln(u_j^n) + v_j^n \ln(v_j^n) \quad (4.31)$$

y

$$\mathcal{H}(n) = \sum_j u_j^n \ln(u_j^n) + v_j^n \ln(v_j^n). \quad (4.32)$$

En la figura (4-7) se muestra el valor de las funciones $H(j, n)$ y $\mathcal{H}(t)$ para los tres sistemas mostrados en la figura(4-2). En estas gráficas se puede observar que el comportamiento $H(t)$ es monótonico decreciente sólo cuando las condiciones iniciales son homogéneas, mientras que $\mathcal{H}(t)$ si decrece monótonicamente en cualquiera de los tres casos mostrados. También se puede observar que tanto $H(\bar{r}, t)$ como $\mathcal{H}(t)$ tienen a un valor constante en todos los casos, indicando que los sistemas alcanzan el equilibrio.

4.3. La segunda simulación

Como se mencionó al principio del capítulo, la segunda simulación es un autómata celular. En este caso, la idea es observar cómo evoluciona un sistema de partículas que se mueven con velocidad $v = +1$ y $v = -1$ en una red unidimensional y que interactúan según la dinámica de Mckean. Para ello se considera inicialmente un número determinado de partículas con velocidad $v = +1$ y $v = -1$ en cada posición del anillo. Estas partículas se moverán un lugar hacia la derecha o la izquierda en un paso temporal y en su nueva posición colisionarán. El número de parejas de partículas que darán lugar a colisiones directas o restitutivas, así como su resultado, dependerá del número de partículas con velocidad $v = +1$ o $v = -1$ que haya en cada lugar del anillo y de las distintas posibilidades de para formar conformar parejas.

El estado de cualquier sistema al tiempo n está determinado por los números u_j^n y v_j^n , que en este caso representan el número de ocupación de partículas de cada especie en cada sitio j del anillo, por lo que las condiciones iniciales están dadas por el conjunto de valores u_j^0 y v_j^0 . La evolución del sistema del tiempo n al tiempo $n + 1$ depende de dos reglas que modifican los números de ocupación u_j^n y v_j^n . La única condición que debe satisfacerse en todo n es que

$$\sum_j u_j^n + v_j^n = N_{tot}, \quad (4.33)$$

ya que no hay ningún mecanismo a través del cual el sistema gane o pierda partículas.

La primera regla de evolución simula el movimiento de las partículas de un sitio a otro de

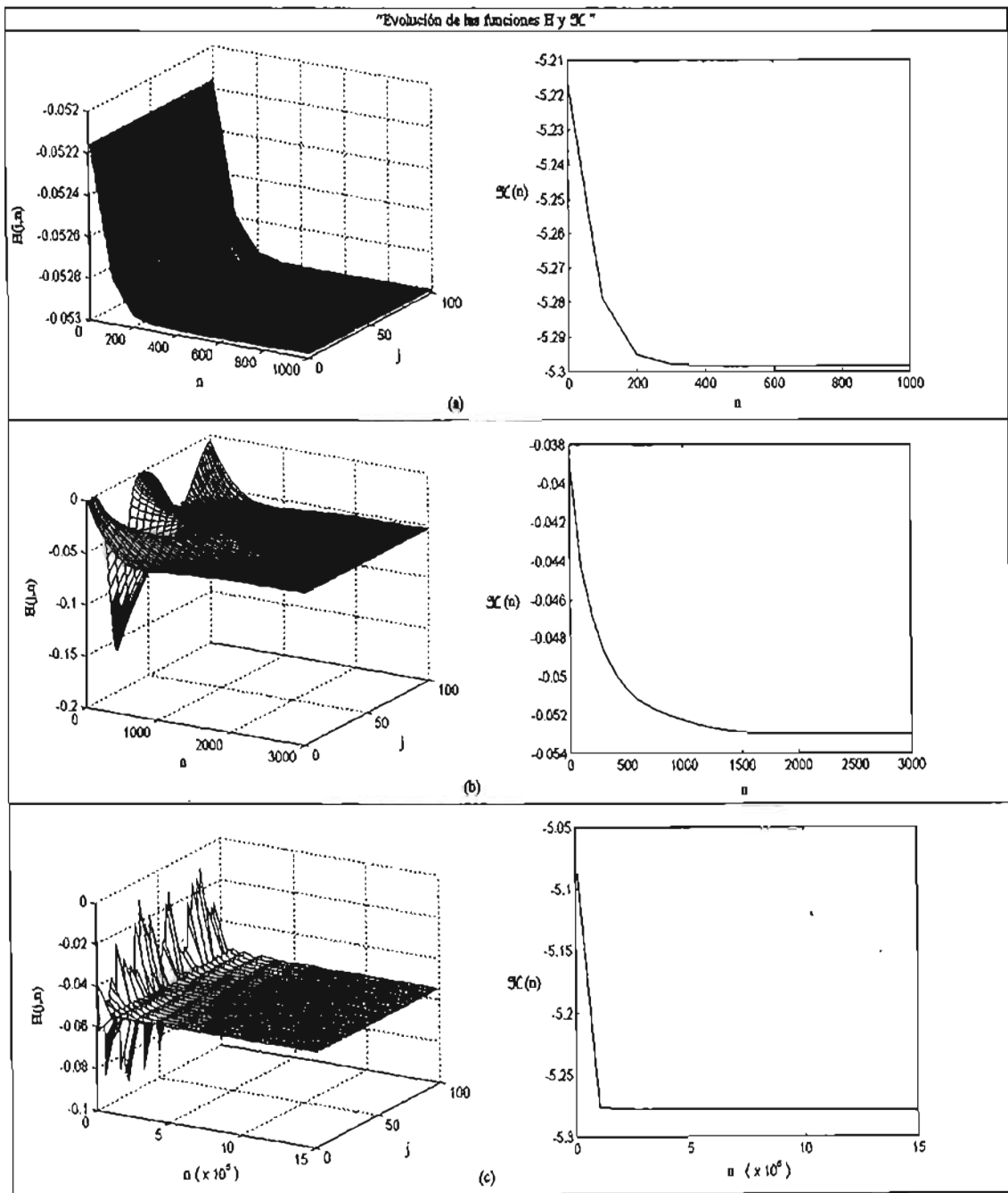


Figura 4-7: Evolución de las funciones $H(j, n)$ y $\mathcal{H}(n)$ para los tres sistemas mostrados en la figura(4-2).

la red, en relación a su velocidad. Esto se traduce en un cambio en los estados u_j^n y v_j^n en cada j como función de sus vecinos inmediatos. Esto es, si se denota por $u_{j,n}^*$ y $v_{j,n}^*$ a los nuevos estados se tiene que

$$u_{j,n}^* = u_{j-1}^n \quad y \quad (4.34)$$

$$v_{j,n}^* = v_{j+1}^n, \quad (4.35)$$

para toda $j = 0, 1, \dots, J$.

La segunda regla reproduce el resultado de la colisión entre las partículas de velocidad $v = +1$ y $v = -1$, en cada j , bajo la dinámica de Mckean. En el lenguaje computacional esto se obtiene al calcular los estados u_j^{n+1} y v_j^{n+1} como resultado de una serie de operaciones algebraicas entre los estados $u_{j,n}^*$ y $v_{j,n}^*$. A continuación se analiza con mayor detalle este procedimiento.

Según las reglas de colisión del modelo de Mckean, después de chocar una partícula con $v = +1$ con otra con $v = -1$, habrá dos partículas con $v = -1$ que se moverán juntas al siguiente lugar de la izquierda. Esto quiere decir que al siguiente tiempo habrá, al menos, dos partículas en el mismo lugar. Es por lo anterior que no se hace ninguna restricción sobre los números de ocupación u_j^{n+1} y v_j^{n+1} , pero esta situación implica que existe más de una posibilidad para relacionar en parejas dichas partículas. De esta relación depende el tipo de colisión que se llevará a cabo y por tanto su resultado.

Por ejemplo, si en el sitio j hay cuatro partículas con velocidad positiva, $u_{j,n}^* = 4$, y tres con velocidad negativa, $v_{j,n}^* = 3$, existen varias formas de relacionar parejas y como producto de su interacción se pueden obtener distintos resultados:

1. Se podrían formar tres parejas conformadas por una partícula de velocidad $v = +1$ y otra con velocidad $v = -1$, denotada por $\{+1, -1\}$, y sobraría una partícula con $v = +1$. Como resultado de estas tres colisiones se obtendrían seis partículas con velocidad negativa y una con $v = +1$. Por lo tanto los números de ocupación finales serían entonces $u_j^{n+1} = 1$ y $v_j^{n+1} = 6$.
2. Otra posibilidad es que se formaran dos parejas de velocidades $\{+1, -1\}$, una pareja de partículas con velocidad $\{+1, +1\}$ y que quedara sola una partícula con $v = -1$. Como resultado de la colisión de las parejas $\{+1, -1\}$ se obtendrían cuatro partículas con

$v = -1$, de la $\{+1, +1\}$ dos partículas con $v = +1$ y sobraría una partícula con $v = -1$. Como resultado se tendría que $u_j^{n+1} = 5$ y $v_j^{n+1} = 2$.

3. También podrían formarse una pareja con velocidades $\{+1, -1\}$, una con velocidades $\{+1, +1\}$ y una con velocidades $\{-1, -1\}$, por lo que sobraría una partícula con $v = +1$. Como resultado de la interacción de las partículas en esta combinación se obtendría que $u_j^{n+1} = 4$ y $v_j^{n+1} = 3$.
4. Por último, se podrían formar dos parejas $\{+1, +1\}$ y una $\{+1, -1\}$, dejando libre una partícula con $v = +1$. El resultado de estas colisiones daría que $u_j^{n+1} = 5$ y $v_j^{n+1} = 2$. Este es el mismo resultado que se obtendría en el segundo caso, pero se obtiene de una combinación inicial diferente.

En cada n y j se calculan todas las posibles combinaciones y se selecciona una de ellas al azar. Una vez escogida cierta combinación, se calcula algebraicamente el resultado de las colisiones y se obtiene el nuevo valor de u_j^{n+1} y v_j^{n+1} para cada j . La rutina numérica se muestra en el Apéndice A bajo el nombre de *sim2.m*.

El hecho de que en el autómata existan distintas formas de relacionar los números de ocupación y de tener que elegir una al azar en cada lugar y en cada tiempo, implica que los resultados deben tatarse con herramientas probabilísticas. Para poder analizar la evolución de un sistema se debe promediar la evolución sobre un conjunto representativo de sistemas idénticos; es decir, hacer un conjunto de realizaciones (o corridas) a partir de la misma condición inicial y obtener números de ocupación promedio para cada iteración y para cada j . Estos números de ocupación promedio, $\langle u_j^n \rangle_R$ y $\langle v_j^n \rangle_R$, se calculan al promediar directamente los números de ocupación u_j^n y v_j^n obtenidos en R realizaciones, por lo que R es un parámetro del autómata. La rutina numérica para calcular los promedios se muestra en el Apéndice A bajo el nombre de *promedios.m*.

Por otra parte, en esta simulación se pueden sembrar inicialmente distintos números totales de partículas, independientemente de la forma en la que estas se distribuyan. Cabe mencionar que se consideraron los mismos tres tipos de condiciones iniciales que en la primera simulación, pero en el autómata los respectivos algoritmos le asignan un número entero a cada j .

De lo discutido en los párrafos precedentes, se observa que la evolución de un sistema en esta

simulación depende tanto del número de realizaciones R como del número total de partículas sembrado inicialmente. Para analizar el efecto de cada uno de estos parámetros, se estudió la evolución de un sistema simple, partiendo de condiciones iniciales homogéneas, de tamaño $J = 100$. A continuación se presenta el análisis realizado.

Resultados Caso 1. Estudio de la evolución del sistema en función del número de realizaciones.

Lo primero que se hizo para determinar como analizar el efecto del número de realizaciones R sobre el comportamiento promedio de un conjunto representativo de sistemas idénticos, fue observar la evolución de una condición inicial considerando un número distinto de realizaciones.

Para ello se consideró un sistema partiendo de una condición inicial en la que se sembraron inicialmente 100 partículas, 70 con velocidad positiva y 30 con negativa, de manera homogénea en un anillo de $J = 100$ sitios. De aquí que $u_j^0 = 7$ y $v_j^0 = 3$, satisfaciéndose la condición (4.33).

En las figuras (4-8) y (4-9) se observa la evolución de los números de ocupación promedio $\langle u_j^n \rangle_R$ y $\langle v_j^n \rangle_R$, durante las primeras veinticinco iteraciones, tomando cuenta un número distinto de realizaciones. En el primer caso $R = 10$, mientras que en el segundo $R = 10000$.

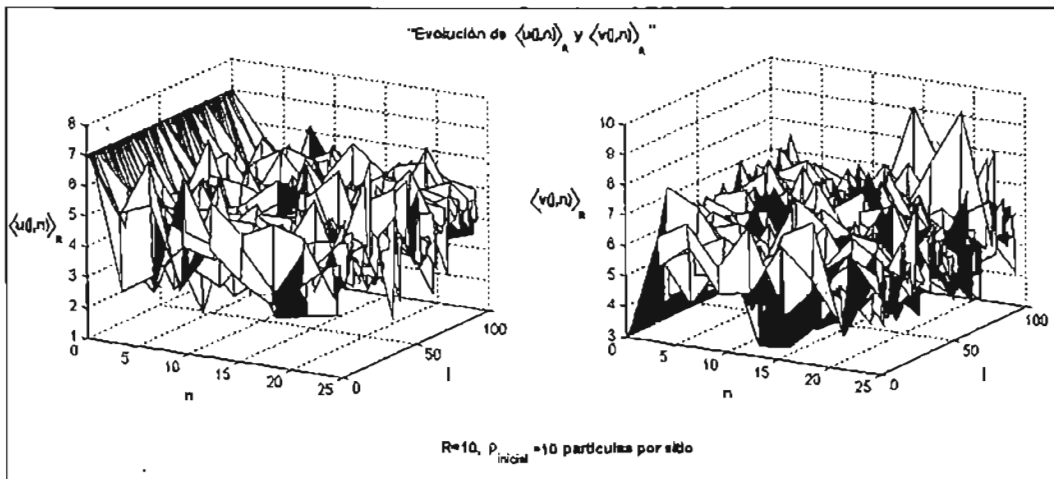


Figura 4-8: Evolución en 25 iteraciones de los números de ocupación promedio considerando $R = 10$ realizaciones, para un sistema de $J = 100$ sitios, con una densidad inicial 10 partículas por sitio y cuyas condiciones iniciales son $u_j^0 = 7$ y $v_j^0 = 3$ para toda j .

Comparando las figuras (4-8) y (4-9), se aprecia que la evolución del sistema se hace más

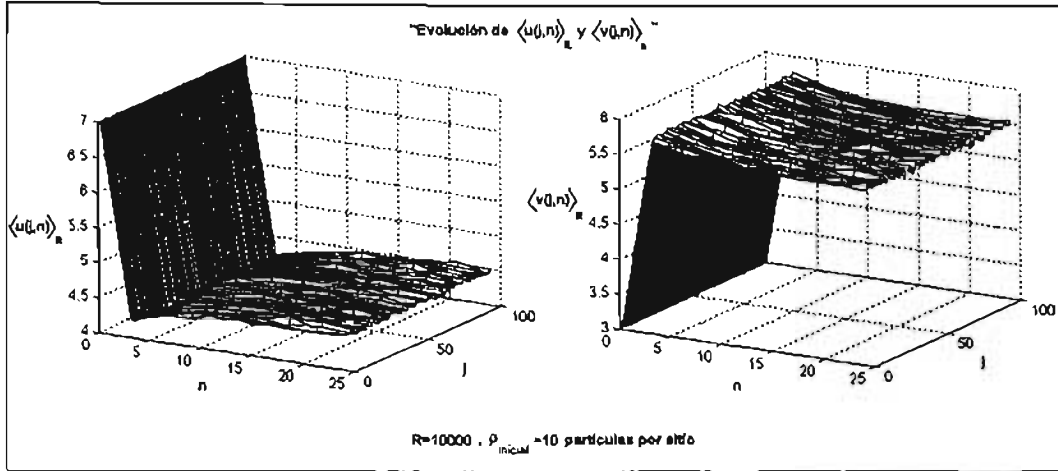


Figura 4-9: Evolución del mismo sistema mostrado en la figura (4-8) considerando $R = 10000$ realizaciones.

suave y los números $\langle u_j^n \rangle_R$ y $\langle v_j^n \rangle_R$ parecen conformar distribuciones homogéneas en cada iteración n cuando R es mayor. Para analizar con mayor claridad este comportamiento y la relación con R , se puede calcular en cada n la desviación estándar de los valores de ocupación promedio, denotada por $\sigma [\langle u_j^n \rangle_R]$ y $\sigma [\langle v_j^n \rangle_R]$, respecto a su media, $\mu [\langle u_j^n \rangle_R]$ y $\mu [\langle v_j^n \rangle_R]$.

Ahora bien, en vez de analizar los valores $\sigma [\langle u_j^n \rangle_R]$ y $\sigma [\langle v_j^n \rangle_R]$ respecto a n y en relación a R , resulta más conveniente analizar los cocientes

$$dnu(n, R) \equiv \frac{\sigma [\langle u_j^n \rangle_R]}{\mu [\langle u_j^n \rangle_R]} \quad (4.36)$$

y

$$dnv(n, R) \equiv \frac{\sigma [\langle v_j^n \rangle_R]}{\mu [\langle v_j^n \rangle_R]}, \quad (4.37)$$

porque proporcionan la fracción que representa la desviación estándar respecto a la media de la distribuciones. De esta forma se puede tener un referente de qué tan grande o pequeña es la dispersión de los valores de la distribución respecto a la media.

Si los números $\langle u_j^n \rangle_R$ y $\langle v_j^n \rangle_R$ conformaran distribuciones homogéneas al promediar sobre un conjunto representativo, entonces los valores de $dnu(n, R)$ y $dnv(n, R)$ deberían tender a

cero conforme aumentara R . En el inciso (a) de la figura(4-10), se muestra el valor de $dnu(n, R)$ y $dnv(n, R)$ en cada n para el sistema de estudio cuando $R = 10$. Como se puede observar, en todas las iteraciones mostradas se obtiene una fracción alta, salvo para $n = 0$ que corresponde a la condición inicial. En el inciso (b) se muestran estas mismas cantidades cuando $R = 10000$ y se observa que son valores mucho más cercanos a cero.

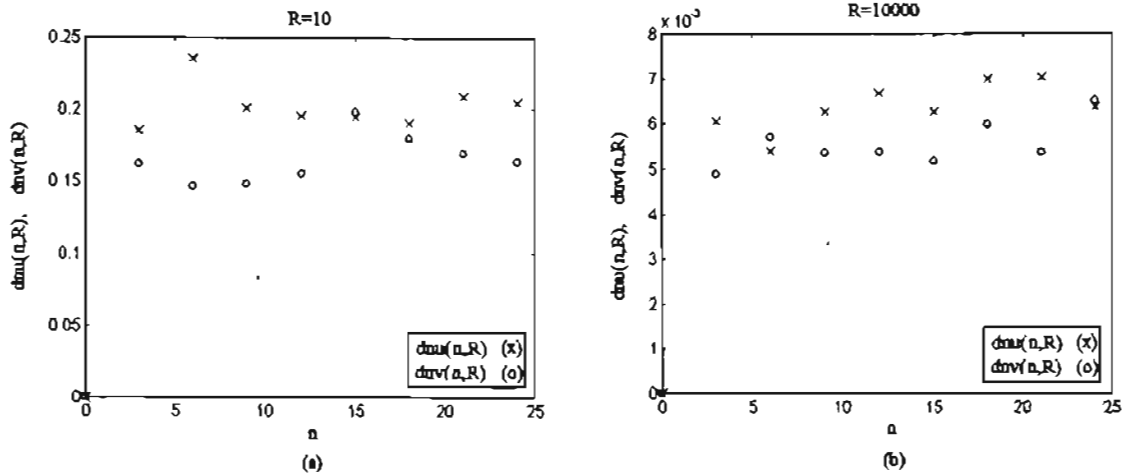


Figura 4-10: Valores $dnu(n; R)$ y $dnv(n; R)$ como función de n para el sistema estudiado cuando (a) $R = 10$ y (b) $R = 10000$.

Por lo anterior, cabe suponer que las distribuciones sí son homogéneas y que la evolución del sistema coincide con la que predice la teoría cinética. Si es así, conforme R aumenta los valores $dnu(n, R)$ y $dnv(n, R)$ deben tender a cero en todas las iteraciones al igual que el promedio de todos ellos. En la figura.(4-11) se muestra como función de R el valor promedio de $dnu(n, R)$ y $dnv(n, R)$, denotado por $\overline{dnu}(n, R)$ y $\overline{dnv}(n, R)$, en las 25 iteraciones en las que se analiza la evolución del sistema.

En esta gráfica se puede apreciar que $\overline{dnu}(n, R)$ y $\overline{dnv}(n, R)$ van disminuyendo conforme el número de realizaciones aumenta. Para $R = 5000$ los valores medios ya son menores que 0.01, es decir la desviación estándar representa menos del 1% del valor medio. Esto sugiere que los números de ocupación, para condiciones iniciales homogéneas, evolucionan de forma que siguen conformando distribuciones homogéneas.

Con esto en mente, al observar la figura (4-9), puede apreciarse que los números de ocupación

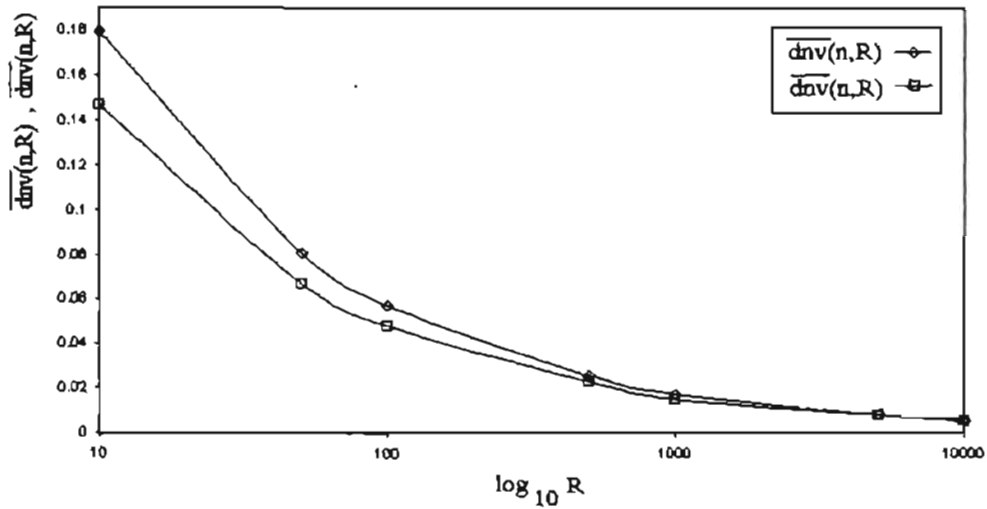


Figura 4-11: Se muestran los valores promedio $\overline{dnv(n,R)}$ y $\overline{dnv(n,R)}$, tomados sobre las primeras 25 iteraciones, como función del número de realizaciones R . Esto es respecto a la evolución del sistema analizado las figuras (4-8) y (4-9).

evolucionan conformando distribuciones homogéneas y que parecen alcanzar una situación de equilibrio, coincidiendo con lo que predice la teoría cinética. Sin embargo, si se mira con cuidado, en la situación de equilibrio que alcanza el sistema no hay el mismo número de partículas de cada tipo en cada lugar, lo que correspondería a las maxwellianas que predice la teoría cinética.

Caso 2. Estudio de la evolución del sistema en función de la densidad inicial de partículas por sitio.

Para analizar la evolución de un sistema respecto al número de partículas sembradas inicialmente, se escogió trabajar con $R = 5000$ dado que para este valor, si las distribuciones fueran homogéneas, la desviación estándar respecto a su media sería menor que el 1%.

El sistema analizado es el mismo, un anillo de $J = 100$, en el que 70% de las partículas tienen velocidad positiva y 30% negativa y el parámetro a inspeccionar es el número de partículas sembradas inicialmente. Dado que las condiciones iniciales del sistema estudiado son homogéneas, se puede hablar en este caso de densidad inicial, $\rho_{inicial}$, en vez de número de partículas sembrado en cada sitio del anillo.

Para analizar el efecto de la densidad, se tomó en cuenta que los números de ocupación

promedio $\langle u_j^n \rangle_R$ y $\langle v_j^n \rangle_R$ conforman distribuciones homogéneas en toda n . Por lo tanto, en vez de evaluar lo que sucede en cada j , basta con analizar los valores medios $\mu [\langle u_j^n \rangle_R]$ y $\mu [\langle v_j^n \rangle_R]$ en un determinado n como función del número de partículas sembrado inicialmente. Para ello, resulta conveniente normalizar las medias respecto a $\rho_{inicial}$, de forma que

$$mnu(n, R) \equiv \frac{\mu [\langle u_j^n \rangle_R]}{\rho_{inicial}} \quad (4.38)$$

y

$$mnv(n, R) \equiv \frac{\mu [\langle v_j^n \rangle_R]}{\rho_{inicial}}. \quad (4.39)$$

En la figura (4-12) se muestran los valores $mnu(n, R)$ y $mnv(n, R)$ en la iteración 50 en función de $\rho_{inicial}$. En ella se aprecia que el sistema alcanza distintos estados en $n = 50$ en función de la densidad inicial. Pero si $\rho_{inicial} = 1000$, $mnu(50, R) = mnv(50, R)$, lo cual sugiere que el sistema puede alcanzar un estado de equilibrio que coincide o es equivalente al que predice la Teoría Cinética.

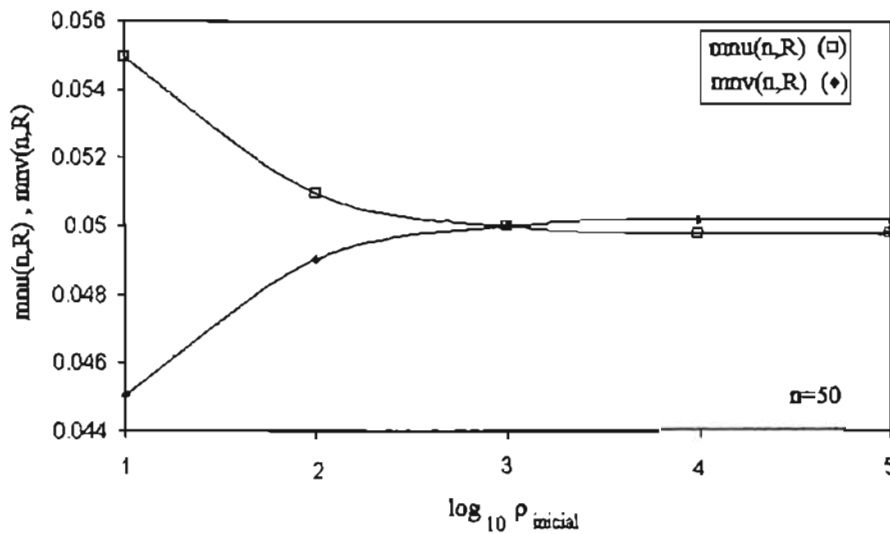


Figura 4-12: Se muestran los valores $mnu(n, R)$ y $mnv(n, R)$ en función de $\rho_{inicial}$, en la iteración $n = 50$ de la evolución del sistema de estudio.

Para verificar lo anterior, en la figura (4-13) se muestra la evolución y el respectivo análisis

del sistema de estudio cuando $\rho_{inicial} = 1000$ partículas por sitio y considerando $R = 5000$ realizaciones para los promedios. Cabe mencionar que en esta figura se muestra la evolución de $\langle U_j^n \rangle_R$ y $\langle V_j^n \rangle_R$, que representan los números de ocupación promedio normalizados al número total de partículas sembrado inicialmente N_{lot} y que están dados por

$$\langle U_j^n \rangle_R = \frac{\langle u_j^n \rangle_R}{N_{lot}} \quad y \quad \langle V_j^n \rangle_R = \frac{\langle v_j^n \rangle_R}{N_{lot}}. \quad (4.40)$$

La evolución de este sistema, sujeto a los valores específicos de R y $\rho_{inicial}$, es muy similar a la que predice la teoría cinética, pero no es igual. Esto se puede apreciar, por ejemplo, observando que $mnu(n, R)$ y $mnu(n, R)$ no alcanzan el valor de equilibrio monotónicamente. También se puede apreciar que los pasos temporales, o número de iteraciones, en los que se alcanza el equilibrio es mucho menor en esta simulación que en la primera.

Para completar la comparación, se calcularon las funciones $H(j, n)$ y $\mathcal{H}(n)$ correspondientes a la evolución de este sistema. En este caso, dichas funciones son

$$H_{R,\rho}(j, n) = \langle U_j^n \rangle_R \ln(\langle U_j^n \rangle_R) + \langle V_j^n \rangle_R \ln(\langle V_j^n \rangle_R) \quad (4.41)$$

y

$$\mathcal{H}_{R,\rho}(n) = \sum_j \langle U_j^n \rangle_R \ln(\langle U_j^n \rangle_R) + \langle V_j^n \rangle_R \ln(\langle V_j^n \rangle_R). \quad (4.42)$$

Su evolución se muestra en las gráficas de la figura (4-14) y se pueden con las mostradas en el inciso (a) de la figura (4-7). Se aprecia claramente que, en este caso, la función H no decrece monotónicamente. Esta diferencia puede interpretarse a partir de la discusión hecha en la sección 2.2, de manera que el sistema estaría alcanzando en ciertos n estados en los que se cumple la hipótesis de caos molecular y en otros estados en los que no. Los mínimos corresponderían a los estados en los que sí se cumple y la función \mathcal{H} podría considerarse como un promedio espacial de H .

La comparación entre los resultados obtenidos con la primera y con la segunda simulación, sirven para abundar sobre las implicaciones de las hipótesis que considera la teoría cinética así como en qué circunstancias es válida para describir la evolución de un sistema. Por ejemplo uno de los aspectos a indagar la relación entre el número total de partículas sembrado en la segunda

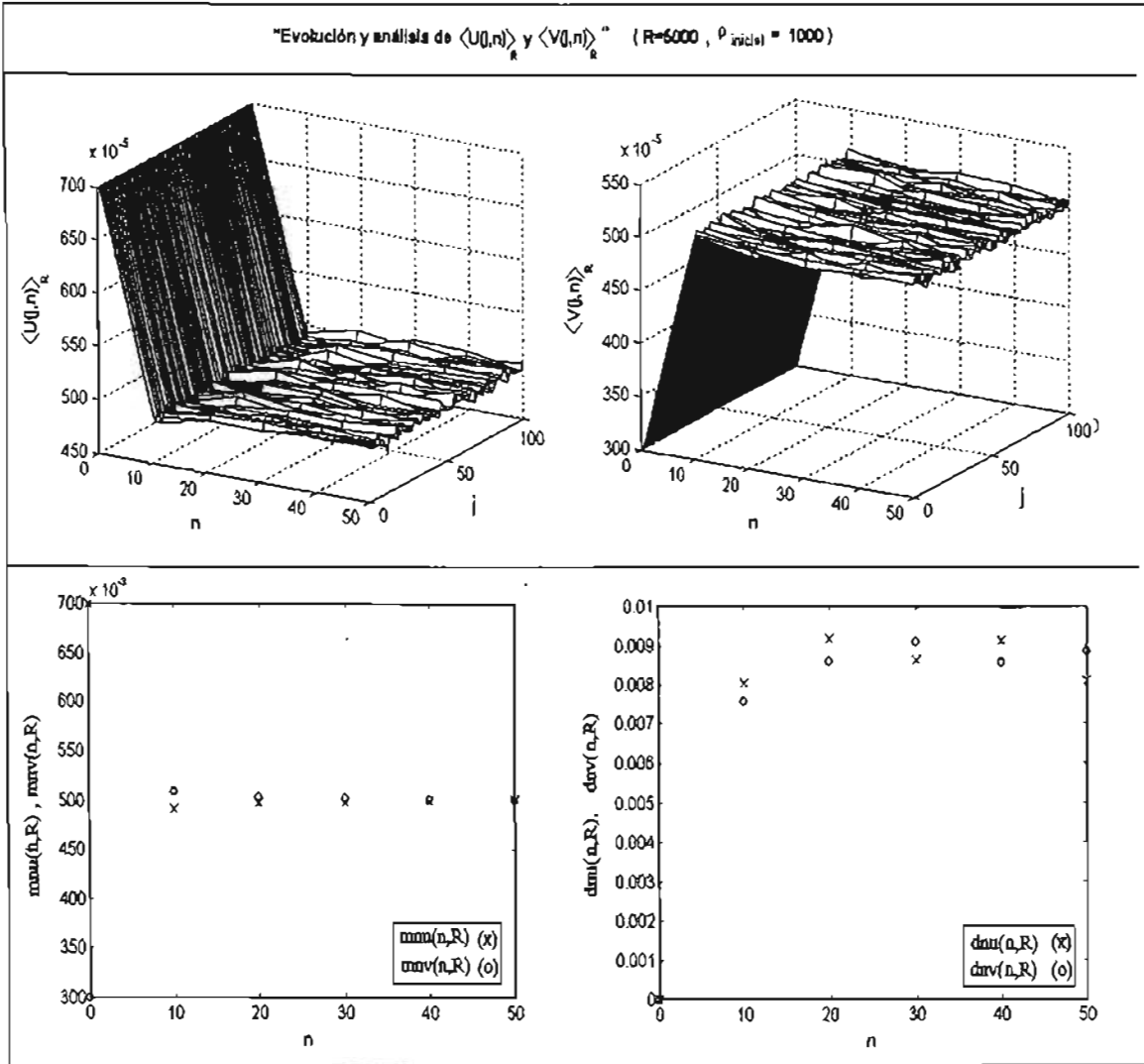


Figura 4-13: Se muestra la evolución de los valores de ocupación promedio normalizados respecto al número total de partículas sembradas, $\langle U_j^n \rangle_R$ y $\langle V_j^n \rangle_R$, a lo largo de 25 iteraciones, con $R = 5000$, con una densidad inicial de $\rho = 1000$ partículas por sitio y con las condiciones iniciales homogéneas $U_j^0 = 0.00007$ y $V_j^0 = 0.00003$. También se muestran los valores correspondientes de $mnu(n, R)$ y $mnu(n, R)$ y $dnv(n, R)$ y $dnv(n, R)$.

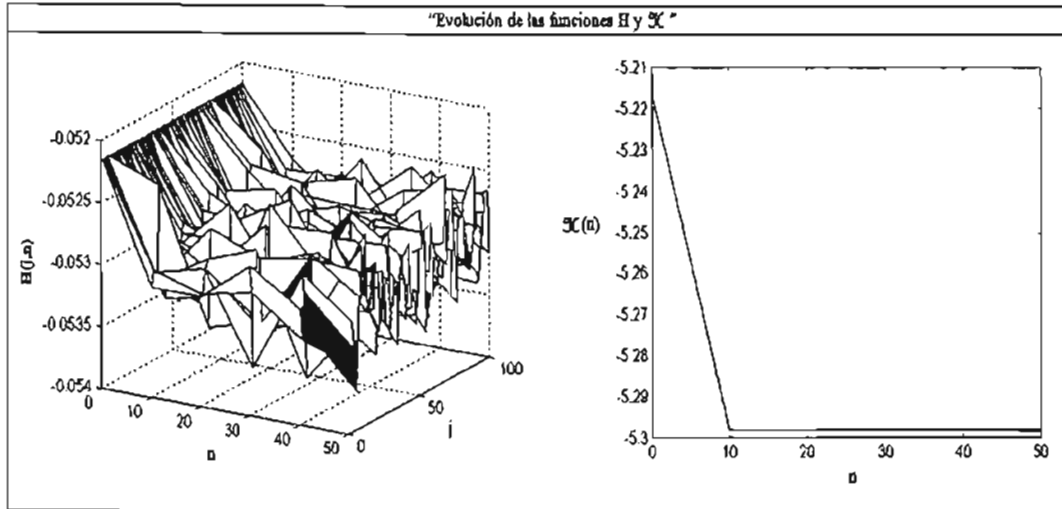


Figura 4-14: Funciones $H(j, n)$ y $\mathcal{H}(n)$ para el sistema de estudio, con $R = 5000$ y $\rho_{inicial} = 1000$.

simulación y la hipótesis de baja densidad bajo la que la Ecuación de Boltzmann es válida.

Para ello, es necesario hacer el mismo análisis de la evolución de sistemas partiendo de otras condiciones iniciales. En particular falta analizar en función de los parámetros de la simulación la evolución de: 1) sistemas partiendo de condiciones iniciales homogéneas pero con otros porcentajes iniciales de partículas sembradas con velocidad positiva y negativa, 2) sistemas partiendo de condiciones iniciales de distribución normal y generadas al azar y 3) sistemas de de otros tamaños. Este análisis y la comparación entre estos resultados y los obtenidos en la primera simulación, quedan como pendientes del presente trabajo.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

En retrospectiva, en este trabajo se presenta una revisión de ciertos modelos simples de la ecuación de Boltzmann y se estudia su evolución. En los modelos analizados, la velocidad es una variable discreta y está limitada a tomar ciertos valores, lo que permite encontrar soluciones analíticas al menos para los casos homogéneos. De esta forma, se revisaron los modelos de Carleman y McKean, cuyas soluciones para el caso homogéneo son ampliamente conocidas pero también se encontraron, para este mismo caso, soluciones analíticas del modelo de Broadwell en dos dimensiones.

A partir del estudio de los modelos mencionados, se desarrolló un modelo simple, unidimensional y de velocidades discretas, que considera colisiones inelásticas. Otra vez, para el caso homogéneo, se pudieron encontrar soluciones analíticas. En función de éstas, se observa que la evolución de un sistema que sigue la dinámica impuesta por dicho modelo refleja satisfactoriamente las características de un proceso disipativo. Sin embargo, este resultado está condicionado al hecho de que el coeficiente de restitución sea igual a la unidad, como si se tratara de colisiones elásticas, para que la masa se conserve. Esta contradicción se debe a que las velocidades permitidas para las partículas pertenecen a un conjunto finito de valores. Debido a que en cada colisión se pierde una cierta cantidad de energía, sólo existe el mecanismo de pérdida en el espacio fase de las partículas cuya velocidad corresponde al valor más alto del conjunto de valores permitidos y no hay un mecanismo que las restituya; o en otras palabras, para estas partículas no existe la colisión restitutiva. El problema está en que la ecuación de Boltzmann considera, por construcción, dicho mecanismo restitutivo.

En principio, se puede incorporar dicho mecanismo dentro del modelo en cuestión si se permiten más valores de velocidad. Esto es, si el conjunto de velocidades considerado es $v = \{-1, 0, 1\}$ y se permiten también las velocidades $v = \pm 2$; se obtienen las colisiones que restituyen a las partículas con velocidad $v = \pm 1$; pero a su vez no se cuenta con las que restituyen a las propias partículas con velocidad $v = \pm 2$. Como se puede inferir, para resolver definitivamente el problema se tiene que permitir cualquier valor de la velocidad, un conjunto también discreto pero no finito, asegurando de esta forma la existencia del mecanismo restitutivo. Sin embargo, conforme se van aumentando los valores permitidos para la velocidad, se aumenta el número de ecuaciones de Boltzmann acopladas y por lo tanto encontrar las soluciones del sistema de ecuaciones se vuelve cada vez un problema más complejo.

La idea de introducir más valores permitidos para la velocidad, aunada al hecho de considerar colisiones inelásticas, concuerda con los fines de este trabajo. En última instancia, lo que se persigue es construir un modelo simple de la ecuación de Boltzmann con estas características, pero en dos dimensiones. En este sentido, como perspectiva a futuro del presente trabajo, aparece la posibilidad inmediata de estudiar este mismo modelo extendiendo el conjunto de velocidades permitidas (por ejemplo considerando $v = \{\pm 2, \pm 1, 0\}$) de manera que se mantenga finito. Lo anterior implicaría seguir considerando el coeficiente de restitución igual a uno, como si se tratara de colisiones elásticas. La otra posibilidad, para evitar dicha contradicción, es considerar un conjunto infinito de velocidades y buscar una extensión al continuo respecto a la velocidad.

Por otro lado, no se encontraron soluciones analíticas en el caso estacionario ni en el general, para ninguno de los cuatro modelos estudiados. Dado que dichas soluciones resultan de interés, se proponen dos simulaciones numéricas de la evolución de sistemas bajo la dinámica de Mckean y se presentan algunos resultados preliminares. Las simulaciones fueron programadas usando el ambiente Matlab y en ellos se consideran tres tipos de condiciones iniciales para los sistemas de partículas: homogéneas -para verificar que haya congruencia con los resultados analíticos-, de distribución normal y de sembrado al azar. De esta forma se simulan condiciones iniciales generales.

En la primera simulación el tiempo y el espacio se consideran variables discretas y las ecuaciones de Boltzmann del modelo de Mckean se escriben en diferencias finitas. La discretización

de las ecuaciones se hizo a través del método de Euler y se tuvo que considerar el Criterio de Lax para satisfacer adecuadamente las condiciones de evolución del modelo. Con base en los resultados obtenidos con esta simulación se puede decir que, para cualquier condición inicial, los sistemas evolucionan hacia un estado de equilibrio, de manera que las distribuciones se homogeneizan mientras que, de manera acoplada, tienden a las maxwellianas del modelo. La forma en la que evolucionan no depende del tamaño del anillo ni del tipo de condición inicial del sistema, pero sí existe una relación entre los tiempos de relajación y ambos aspectos. Para la misma condición inicial, los tiempos de relajación aumentan conforme el tamaño del sistema lo hace; mientras que los sistemas que parten de condiciones iniciales de sembrado al azar tardan más en alcanzar las maxwellianas. Esto tiene sentido, ya que en este tipo de condición inicial las distribuciones están más lejos de una distribución homogénea; por lo que el proceso de irse homogeneizando e ir tendiendo a las maxwellianas de manera acoplada requiere de más iteraciones. La función H de Boltzmann asociada a la evolución de los sistemas estudiados, se comporta como lo predice la Teoría Cinética.

La segunda simulación es un Autómata Celular que reproduce la evolución de un conjunto de partículas con velocidad $v = +1$ y $v = -1$, distribuidas en una red unidimensional, que se mueven y que colisionan bajo la dinámica de Mckean. Por tanto, el tiempo y el espacio son variables discretas y la condición inicial corresponde a la asignación de un número de ocupación de partículas con velocidad $v = +1$ y $v = -1$ para cada lugar del anillo. La evolución de un estado se consigue aplicando en cada paso temporal reglas entre números de ocupación, de manera que se reproduce el movimiento y la interacción entre partículas. Dado que en cada lugar del anillo puede haber más de dos partículas de cada especie, las parejas que colisionan y el resultado de su interacción dependerá de una elección hecha al azar, por lo que se hace un análisis probabilístico sobre el comportamiento de un conjunto representativo de sistemas idénticos. La evolución de un sistema partiendo de ciertas condiciones iniciales se obtiene al reproducir varias veces la evolución de esas condiciones iniciales y promediar el resultado sobre el número de repeticiones o realizaciones hechas. Con este autómata se analizó la evolución de un sistema con condiciones iniciales homogéneas y de tamaño $J = 100$, en función del número de realizaciones y del número de partículas total sembrado inicialmente. Los resultados de este análisis se compararan con los obtenidos en la primera simulación para las condiciones iniciales

equivalentes, determinando bajo qué circunstancias los comportamientos son similares. Cabe mencionar que aunque la evolución pueda ser similar bajo ciertas circunstancias, el comportamiento de la función H en las dos simulaciones es esencialmente diferente. Esto tiene sentido porque la evolución de H está relacionada con la hipótesis de caos molecular. Queda pendiente simular con este autómata la evolución de sistemas bajo otras condiciones iniciales, de manera que se pueda establecer, en general, bajo qué condiciones las simulaciones son equivalentes. En el fondo esto puede considerarse como una forma de contrastar la dinámica real que establece el modelo con la que se establece bajo las hipótesis de la Teoría Cinética.

También queda como pendiente hacer simulaciones del mismo tipo para el modelo de Broadwell simplificado y el modelo que considera colisiones inelásticas. El propósito de desarrollar este tipo de simulaciones es determinar bajo qué circunstancias se pueden modelar dinámicas más complejas e ir preservando ciertas características del enfoque cinético; de manera que, bajo el esquema mostrado en el Capítulo 2, se puedan obtener ecuaciones fenomenológicas o de conservación.

Bibliografía

- [1] Moon S. J., Shattuck M.D., Swift J.B. “*Velocity distributions and correlations in homogeneously heated granular media*”, arXiv: cond-mat/0105323v2.
- [2] Santos, A., Ernst M.H. “*Exact steady-state of the Boltzmann equation: A driven one-dimensional inelastic Maxwell gas*”, Phys. Rev. E, **68**, 0111205 (2003).
- [3] Garzó, V., Dufty, J.W. “*Hydrodynamic equations for granular mixtures*”, arXiv: cond-mat/0307426v1.
- [4] Herrmann, H. J., Luding S. L., Cafiero R. “*Dynamics of granular systems*”, Phys. Rev. A, **295**, 93-100, 2001.
- [5] Savage, S. B. *The mechanics of rapid granular flows*, Advances in Applied Mechanics, Vol. 24, 289-366, 1984.
- [6] Goldshtein, A. y M. Shapiro. “*Mechanics of collisional motion of granular materials. Part 1. General hydrodynamic equations*”, J. Fluid Mech., **282**, 75-114, 1995.
- [7] Campbell, C. S. “*Rapid granular flows*”, Annu. Rev. Fluid Mech., **22**, 57-92, 1990.
- [8] Morales, G. E., Lomnitz-Adler, J., Romero-Rochín, V., Chicharro-Serra, R., Peralta-Fabi, R. “*Two Dimensional Avalanches as stochastic Markov process*”, Phys.Rev.E., **47**,R2229-, 1993.
- [9] Peralta-Fabi, R. Procesos estocásticos y medios granulados, Memorias de la EMFE7, Guanajuato, 101-152, 1993.

- [10] Ernst, M. H. Introduction to kinetic theory of granular rapid flows, NATO-ASI-“Kinetic methods for non-equilibrium many-body systems”, Leiden, 1998.
- [11] van Noije, T. P. C., Ernst, M. H. y Brito, R. “*Ring kinetic theory for an idealized granular gas*”, *Physica A*, **251**, 266-283, 1998.
- [12] Sela, N. y Goldhirsch, I. “*Hydrodynamic equations for rapid flows of smooth inelastic spheres, to Burnett order*”, *J. Fluid Mech.*, **361**, 41-74, 1998.
- [13] Ernst, M. H. “*Exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation*”, en Fundamental problems in statistical mechanics V, North-Holland Publishing Company, 1980.
- [14] Boltzmann, L., Lectures on gas theory, Berkeley, 1964, Capítulo 2.
- [15] Huang, K., Statistical mechanics, J.Wiley & Sons, 1987, Capítulo 3.
- [16] Kestin, J. y J. R. Dorfman. A course in statistical thermodynamics, Academic Press Inc., 1971.
- [17] Brush, S. G. Kinetic Theory, Vol. 3, Pergamon Press, 1972.
- [18] Grad, H. “*On the kinetic theory of rarefied gases*”, en Communications on pure and applied mathematics, Vol.2, 1949, p.p. 331-407.
- [19] Resibois, P. y M. de Leener. Classical kinetic theory of fluids, Wiley-Interscience Publication, 1977.
- [20] Apuntes del curso “Mecánica Estadística”, impartido por Dr. Ramón Peralta-Fabi, Facultad de Ciencias, UNAM, México, 1996.
- [21] Uhlenbeck, E. G. y G. W. Ford. Lectures on statistical mechanics, Ed. American Mathematical Society, 1963.
- [22] Batchelor, G. K. An introduction to fluid dynamics, Cambridge University Press, 1967.
- [23] Apuntes del curso “Mecánica de Fluidos”, impartido por Dr. Ramón Peralta-Fabi, Facultad de Ciencias, UNAM, México, 1997.

- [24] Goldhirsch, I. y G. Zanetti. "*Clustering in dissipative gases*", Phys. Rev. E, **70**, 931103, 1993.
- [25] Karlin, I. V., Succi, S., "*Equilibria for discrete kinetic equations*", Phys. Rev. E, **58**, R4053, 1998.
- [26] Bobylev, A., Caraffini, G. L., Spiga, G.; "*Non stationary two-dimensional potential flows by the Broadwell model equations*", Eur. J. Mech. B-Fluids **19** (2000) 303-315.
- [27] Guo, Z., Zhao, T.S., "*Discrete velocity and lattice Boltzmann models for binary mixtures of nonideal fluids*", Phys. Rev. E, **68**, 035302(R), 2003.
- [28] Broadwell, J. E. "*Shock structure in a simple discrete velocity gas*", Phys. Fluids, **7**, 1243, 1964.
- [29] Hardy, J., T. Pomeau y O. de Pazzis. "*Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions*", J. Math. Phys., Vol. 14, No.12, 1973.
- [30] Hoogerbrugge, P. J., Koelman, J. M. A., "*Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with dissipative Particle Dynamics*", Erophys. Lett., **19**, 1992.
- [31] Rechtman, R. *Una introducción a autómatas celulares* en Ciencias, No. 24, Octubre 1991, p.p.23-29.
- [32] Mitchell, M., Crutchfield, J. y P.T. Hraber. *Evolving Cellular Automata to perform computations: Mechanism and Impediments*, suplemento de Physica D, 18 de octubre, 1993.
- [33] Hasslacher, B. *Discrete fluids* en Los Alamos Science Special Issue, 1987, p.p. 175-217.
- [34] Press, Flamery Tenkolsky y Vetterling. Numerical recipes in C, 2da edición, Cambridge University Press, Capítulos 4 y 19.
- [35] *Using Matlab (1996)*", MathWorks, Inc., E.U., 1996.
- [36] Hoel, P. G. Introduction to mathematical statistics, 2da edición, Ed. John Wiley & Sons, Inc., Canada, 1954.

Apéndice A

Apéndice: Rutinas numéricas en Matlab

Sim1.m

```
%Simulación numérica del Modelo de McKean ( discretización usando método de Euler y  
Criterio de Lax)
```

```
%(3 condiciones iniciales)
```

```
%Tipo de condición inicial
```

```
Dist = input( '¿Para qué tipo de distribución (0: homogénea, 1: normal, 2: azar)?' );
```

```
%Rutinas que generan condiciones iniciales
```

```
if Dist == 1
```

```
FNu = input( 'Fracción de partículas con vel.=1 = ' );
```

```
FNv = 1 - FNu;
```

```
Mu = input( 'Media de la distribución de partículas con v = 1? ' );
```

```
Mv = input( 'Media de la distribución de partículas con v = -1? ' );
```

```
Sigmau = input( 'Sigma de la distribución de partículas con v = 1? ' );
```

```
Sigmav = input( 'Sigma de la distribución de partículas con v = -1? ' );
```

```
end;
```

```
%Tamaño del anillo
```

```

xmin = 1;
xmax = input ( 'Máximo en el intervalo x = ' );
x = xmin:1:xmax;
a = size( x );
M = a( 2 );
if Dist == 1
[Uo, Vo] = normal( x, xmax, M, FNu, FNv, Mu, Mv, Sigmau, Sigmax );
Ymin = 0;
Ymax = max( [max(Uo) max(Vo)] );
elseif Dist == 2
Fr = input( 'Porcentaje de la franja (en decimales) = ' );
FUo = input( 'Fracción de partículas con vel.=1 = ' );
Fuo = FUo/M;
FVo = 1 - FUo;
Fvo = FVo/M;
UUo = (rand( size( x ) )-0.5)*Fr;
VVo = (rand( size( x ) )-0.5)*Fr;
Uoo = FUo*ones( size( x ) );
Uuo = Uoo + UUo;
Voo = FVo*ones( size( x ) );
Vvo = Voo + VVo;
if FUo == 0
Us = zeros( size( x ) );
Vs = abs( Vvo );
elseif FUo == 1
Us = abs( Uuo );
Vs = zeros( size( x ) );
else
Us = abs( Uuo );
Vs = abs( Vvo );

```

```

end;
SumUs = sum( Us );
SumVs = sum( Vs );
SumTot2 = SumUs + SumVs;
Uo = Us/SumTot2;
Vo = Vs/SumTot2;
Ymin = 0;
Ymax = 1.1*max( [max(Uo) max(Vo)] );
else
UUo = input( 'Fracción de partículas con vel.=1 = ' );
Uuo = UUo/M;
Uo = Uuo*ones( size( x ) );
VVo = 1 - UUo;
Vvo = VVo/M;
Vo = Vvo*ones( size( x ) );
Ymin = 0;
Ymax = Uuo+Vvo;
end;
mUo = mean( Uo );
mVo = mean( Vo );
desUo = std( Uo );
desVo = std( Vo );
%Para checar que se estén generando correctamente las condiciones iniciales
SumToto = sum( Uo+Vo );
disp( ['Suma total de frac. o no. total de part. normalizado : ' num2str( SumToto )] );
%Gráficas de las condiciones iniciales
plot( x, Uo, 'wx', x, Vo, 'wo' ); axis([xmin xmax Ymin Ymax]);
drawnow;
disp( 'Pausa...' );
pause;

```

```

%variables que guardan la evolución temporal
U = zeros( size(Uo) );
V = zeros( size(Vo) );

%evolución temporal
Rel = input ( '¿Buscar tiempo de relajación? ', 's' );
CCCC = 's';
T = 1;
i = 1;

%Subrutina para encontrar el tiempo de relajación
if strcmp( Rel, 's' ) == 1 %(0)
disp( 'Ya entre en el ciclo' );
to = clock;
e = 0.5/M;
while all(U ~ = e) & all(V ~ = e), %(a)
for k = 1:M,
if k == 1
c = k+1;
b = M;
elseif k == M
c = 1;
b = M-1;
else
c = k+1;
b = k-1;
end;
U(k) = Uo(b) + 0.25*(Vo(c)+Vo(b))*(Vo(c)+Vo(b)-Uo(c)-Uo(b));
V(k) = Vo(c) - 0.25*(Vo(c)+Vo(b))*(Vo(c)+Vo(b)-Uo(c)-Uo(b));
end;
mU = mean( U );
mV = mean( V );

```



```

desU = std( U );
desV = std( V );
if mV == 0
disp( ['¡¡ojo!! ¡no hay colisiones, por lo que no relaja!'] );
break;
else
relaja1U = (1/e)*(abs(mU-e));
relaja1V = (1/e)*(abs(mV-e));
relaja2U = (1/mU)*(abs(mU-desU));
relaja2V = (1/mV)*(abs(mV-desV));
end;
vectoruno = ones(size(U));
if any( U < 0 ) | any( V < 0 )
disp( ['¡OJO! Hay u´s o v´s negativas en la iteración = ' num2str( i ) ] );
SumTotT = sum( U+V );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k, en esta iteración = ' num2str( SumTotT ) ] );
break;
end;
if (relaja1U < 0.0001 & relaja2U > 0.999) & (relaja1V < 0.0001 & relaja2V > 0.999)
SumTotT = sum( U+V );
disp( ['No. de iteraciones en que relaja= ' num2str( i ) ] );
t1 = clock;
treal = etime(t1,to);
disp( ['tiempo real = ' num2str( treal ) ] );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k = ' num2str( SumTotT ) ] );
disp( ['Valor de equilibrio U = ' num2str( mU,5 ) ] );
disp( ['Valor de equilibrio V = ' num2str( mV,5 ) ] );
disp( ['Valor de dispersión de U = ' num2str( desU,5 ) ] );
disp( ['Valor de dispersión de V = ' num2str( desV,5 ) ] );
plot( x, Uo, 'r-', x, Vo, 'b-' ); axis([xmin xmax Ymin Ymax]);

```

```

drawnow;
break;
elseif abs((U./V)-vectoruno) <= 0.1e-010
SumTotT = sum( U+V );
disp( ['No. de iteraciones en que relaja= ' num2str( i ) ] );
t1 = clock;
treal = etime(t1,to);
disp( ['tiempo real = ' num2str( treal ) ] );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k = ' num2str( SumTotT ) ] );
disp( ['Valor de equilibrio U = ' num2str( mU,5 ) ] );
disp( ['Valor de equilibrio V = ' num2str( mV,5 ) ] );
disp( ['Valor de dispersión de U = ' num2str( desU,5 ) ] );
disp( ['Valor de dispersión de V = ' num2str( desV,5 ) ] );
plot( x, Uo, 'r-', x, Vo, 'b-' ); axis([xmin xmax Ymin Ymax]);
drawnow;
break;
end;
T = T+1;
i = i+1;
Uo = U;
Vo = V;
end;%(a)
disp( '¡ya!' );
%Subrutina para ver y graficar la evolución del sistema
else%(0)
evol = input( '¿qué quieres hacer:1= ver y/o guardar c/Tmax; 2 = archivo evolución de
U,V hasta imax, c/Tmax?' );
Tmax = input( '¿Cada cuántas iteraciones ver o guardar (Tmax)?=' );
if evol == 1%(1)
Salvar = input( '¿Guardar? ', 's' );

```

```

if strcmp( Salvar, 's' ) == 1
Nombreach = input( 'Nombre del archivo: ', 's' );
i = 0;
fid = fopen( [Nombreach '.txt'], 'wt' );
fprintf( fid, '%6.0f', i );
fprintf( fid, '\t%f', mUo );
fprintf( fid, '\t%f', mVo );
fprintf( fid, '\t%f', desUo );
fprintf( fid, '\t%f', desVo );
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', Uo(qqq) );
end;
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', Vo(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
end;
while strcmp( CCCC, 's' ) == 1,
to = clock;
for k = 1:M,
if k == 1
c = k+1;
b = M;
elseif k == M
c = 1;
b = M-1;
else
c = k+1;
b = k-1;
end;

```

```

U(k) = Uo(b) + 0.25*(Vo(c)+Vo(b))*(Vo(c)+Vo(b)-Uo(c)-Uo(b));
V(k) = Vo(c) - 0.25*(Vo(c)+Vo(b))*(Vo(c)+Vo(b)-Uo(c)-Uo(b));
end;
mU = mean( U );
mV = mean( V );
desU = std( U );
desV = std( V );
if any( U < 0 ) | any( V < 0 )
disp( ['¡OJO! Hay u´s o v´s negativas en la iteración = ' num2str( i )] );
SumTotT = sum( U+V );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k para esta iteración = ' num2str( SumTotT )] );
break;
end;
if T == Tmax
plot( x, Uo, 'r-', x, Vo, 'b-' ); axis([xmin xmax Ymin Ymax]);
drawnow;
T = 0;
SumTotT = sum( U+V );
t1 = clock;
treal = etime(t1,to);
disp( ['tiempo real = ' num2str( treal )] );
disp( ['No. de iteraciones = ' num2str( i )] );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k = ' num2str( SumTotT )] );
desU = std( U );
desV = std( V );
CCCC = input( '¿Continuar? ', 's' );
if strcmp( Salvar, 's' ) == 1
fprintf( fid, '%6.0f', i );
fprintf( fid, '\t%f', mU );
fprintf( fid, '\t%f', mV );

```

```

fprintf( fid, '\t%f', desU );
fprintf( fid, '\t%f', desV );
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', U(qqq) );
end;
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', V(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
end;
end;
T = T+1;
i = i+1;
Uo = U;
Vo = V;
end;
else %%(1)
imax = input( 'Hasta qué iteración guardar(imax)?= ' );
Nombreach = input( 'Nombre del archivo: ', 's' );
i = 0;
fid = fopen( [Nombreach '.txt'], 'wt' );
fprintf( fid, '%6.0f', i );
fprintf( fid, '\t%f', mUo );
fprintf( fid, '\t%f', mVo );
fprintf( fid, '\t%f', desUo );
fprintf( fid, '\t%f', desVo );
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', Uo(qqq) );
end;
for qqq = 1:M,

```

```

fprintf( fid, '\t%f', Vo(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
while i ~ = imax,
for k = 1:M,
if k == 1
c = k+1;
b = M;
elseif k == M
c = 1;
b = M-1;
else
c = k+1;
b = k-1;
end;
U(k) = Uo(b) + 0.25*(Vo(c)+Vo(b))*(Vo(c)+Vo(b)-Uo(c)-Uo(b));
V(k) = Vo(c) - 0.25*(Vo(c)+Vo(b))*(Vo(c)+Vo(b)-Uo(c)-Uo(b));
end;
mU = mean( U );
mV = mean( V );
desU = std( U );
desV = std( V );
if any( U < 0 ) | any( V < 0 )
disp( '|¡OJO! Hay u´s o v´s negativas en la iteración = ' num2str( i )| );
SumTotT = sum( U+V );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k para esta iteración = ' num2str( SumTotT )| );
break;
end;
if T == Tmax
T = 0;

```

```

desU = std( U );
desV = std( V );
fprintf( fid, '%6.0f', i );
fprintf( fid, '\t%f', mU );
fprintf( fid, '\t%f', mV );
fprintf( fid, '\t%f', desU );
fprintf( fid, '\t%f', desV );
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', U(qqq) );
end;
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t%f', V(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
end;
if i == imax
plot( x, Uo, 'r-', x, Vo, 'b-' ); axis([xmin xmax Ymin Ymax]);
drawnow;
end;
T = T+1;
i = i+1;
Uo = U;
Vo = V;
end;
end;%(1)
disp( 'fin!' );
if strcmp( Salvar, 's' ) == 1
fclose( fid );
end;
end;%(0)

```

```

%Subrutina condiciones iniciales normales
function [Uo, Vo] = normal( x, xmax, M, NU, NV, mediaU, mediaV, sigmaU, sigmaV )

%Distribución normal para la simulación 1 en los puntos especificados por el vector x, el
cual, para que la distribución este normalizada a 1, debe tener
%un paso constante.
%Esto es,  $x(i) - x(i-1) = \text{constante}$  para cualquier  $i$ .
%(Ojo esto implica que x representa aquí a un vector, ej.  $x=0:1:10$ )
%Constante gaussiana, es decir, la que normaliza a 1:
CU = 1/(sqrt( 2*pi )*sigmaU);
CV = 1/(sqrt( 2*pi )*sigmaV);
%Dependiendo de cuantas posiciones hay, cuantas x's, es el vector con los valores
%requeridos.
%Para hacer correctamente la distribución, hay que distribuir en el centro del intervalo
definido por xmax y después recorrer a la media deseada
% considerando las condiciones de frontera.
mediana = round(xmax/2);
ru = mediaU - mediana;
rv = mediaV - mediana;
gU = CU*exp( -(x-mediana).^2/(2*sigmaU^2) );
gV = CV*exp( -(x-mediana).^2/(2*sigmaV^2) );
bu = sum( gU );
gU = gU/bu;
bv = sum( gV );
gV = gV/bv;
%Una vez calculada la distribución normal para cada tipo de partículas se obtiene los
porcentajes correspondientes.
Uc = NU*gU;
Vc = NV*gV;
UUc = sum( Uc );

```



```

VVc = sum( Vc );
Sumc = UUc+VVc;
%Para mover a la media deseada, considerando las condiciones periódicas a la frontera
for ku = 1:M,
ju = ku+ru;
if ju > M
ju = ju - M;
elseif ju < 1
ju = ju + M;
end;
Uo(ju) = Uc(ku);
end;
for kv = 1:M,
jv = kv+rv;
if jv > M
jv = jv - M;
elseif jv < 1
jv = jv + M;
end;
Vo(jv) = Vc(kv);
end;
UUo = sum ( Uo );
VVo = sum ( Vo );
Sum = UUo+VVo;

```

Sim2.m

```

%Simulación numérica del modelo de Mckean (autómata celular)
%Tipo de condición inicial
Dist = input( '¿Para qué tipo de distribución (0: homogénea, 1: normal, 2: azar)?' );

```

```

Ntot = input( '¿Número total de partículas?' );
%Rutinas que generan condiciones iniciales
if Dist == 1
FNU = input( 'Fracción de partículas con vel.=1 = ' );
FNv = 1 - FNU;
Mu = input( 'Media de la distribución de partículas con v = 1? ' );
Mv = input( 'Media de la distribución de partículas con v = -1? ' );
Sigmau = input( 'Sigma de la distribución de partículas con v = 1? ' );
Sigmax = input( 'Sigma de la distribución de partículas con v = -1? ' );
end;
%Tamaño del anillo
xmin = 1;
xmax = input ( 'Máximo en el intervalo x = ' );
x = xmin:1:xmax;
a = size( x );
M = a( 2 );
if Dist == 1
[NUoini, NVoini] = na( x, xmax, Ntot, M, FNU, FNv, Mu, Mv, Sigmau, Sigmax );
Ymin = 0;
Ymax = max( [max(NUoini) max(NVoini)] );
elseif Dist == 2
Fr = input( 'Porcentaje de la franja (en decimales) = ' );
FUo = input( 'Fracción de partículas con vel.=1 = ' );
Fuo = FUo/M;
FVo = 1 - FUo;
Fvo = FVo/M;
UUo = (rand( size( x ) )-0.5)*Fr;
VVo = (rand( size( x ) )-0.5)*Fr;
Uoo = FUo*ones( size( x ) );
Uuo = Uoo + UUo;

```

```

Voo = FVo*ones( size( x ) );
Vvo = Voo + VVo;
Us = abs( Uuo );
Vs = abs( Vvo );
SumUs = sum( Us );
SumVs = sum( Vs );
SumTot2 = SumUs + SumVs;
Uo = Us/SumTot2;
Vo = Vs/SumTot2;
NUoini = round(Uo*Ntot);
NVoini = round(Vo*Ntot);
Ymin = 0;
Ymax = 1.1*max( {max(NUoini) max(NVoini)} );
else
UUo = input( 'Fracción de partículas con vel.=1 = ' );
Uuo = UUo/M;
Uo = Uuo*ones( size( x ) );
VVo = 1 - UUo;
Vvo = VVo/M;
Vo = Vvo*ones( size( x ) );
NUoini = round(Uo*Ntot);
NVoini = round(Vo*Ntot);
Ymin = 0;
Ymax = (Uuo+Vvo)*Ntot;
end;

%Para checar que se estén generando correctamente las condiciones iniciales
SumToto = sum( Uo+Vo );
SumN = sum(NUoini+NVoini);
disp( ['Suma total de frac. o no. total de part. normalizado : ' num2str( SumToto ) ] );
disp( ['Total de partículas después de distribuciones iniciales : ' num2str( SumN ) ] );

```

```

%Gráficas de las condiciones iniciales
plot( x, NUoini, 'r-', x, NVoini, 'b-' ); axis([xmin xmax Ymin Ymax]);
drawnow;
disp( 'Pausa...' );
pause;
NoEns = input( '¿Cuántas corridas quieres guardar(No. sistemas del ensamble)? : ');
imax = input( '¿Hasta que iteración?, imax = ' );
Tmax = input( '¿Cada cuantas iteraciones quieres guardar? = ' );
Nombreach = input( 'Nombre del archivo: ', 's' );
fid = fopen( [Nombreach '.txt'], 'wt' );
for j = 1:NoEns,%(1)
i = 0;
T = 0;
NUo = NUoini;
NVo = NVoini;
fprintf( fid, '%6.0f', j );
fprintf( fid, '\t %6.0f', i );
for qq = 1:M,
fprintf( fid, '\t %6.0f', NUo(qq) );
end;
for qq = 1:M,
fprintf( fid, '\t %6.0f', NVo(qq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
U = zeros( size(NUo) );
V = zeros( size(NVo) );
i = 1;
T = 1;
while i ~= imax+1,
%Subrutina de movimiento

```

```

for k = 1:M,
if k == 1
c = 2;
b = M;
elseif k == M
c = 1;
b = M-1;
else
c = k+1;
b = k-1;
end;
Um(k) = NUo(b);
Vm(k) = NVo(c);
end;

%subrutina de colisión
for k = 1:M, %(2)
u = Um(k);
v = Vm(k);
if v == 0 %no pasa nada (3)
U(k)=u;
V(k)=v;
else
if u == 0 %colision homogenea a fuerza %(4)
if rem(v,2) == 0
U(k)=v/2;
V(k)=v/2;
else
U(k)=(v-1)/2;
V(k)=(v+1)/2;
end;
end;
end;

```

```

elseif u == v
if rem(v,2) == 0
lmax = v/2;
l = round(lmax*rand);
U(k) = 3*l;
V(k) = 2*v-3*l;
else
lmax = (v-1)/2;
l = round(lmax*rand);
U(k) = 3*l;
V(k) = 2*v-3*l;
end;
elseif u > v
if rem(u-v,2) == 0
if rem(v,2) == 0
lmax = v/2;
l = round(lmax*rand);
U(k) = u-v+3*l;
V(k) = 2*v-3*l;
else
lmax = (v-1)/2;
l = round(lmax*rand);
U(k) = u-v+3*l;
V(k) = 2*v-3*l;
end;
else
lmax = v;
l = round(lmax*rand);
if rem(l,2) == 0
U(k) = u-v+(3*l/2);

```

```

V(k) = 2*v-(3*l/2);
else
U(k) = u-v+((3*l-1)/2);
V(k) = 2*v-((3*l-1)/2);
end;
end;
else%( u < V )
if rem(v-u,2) == 0
if rem(u,2) == 0
lmax = u/2;
l = round(lmax*rand);
U(k) = (v-u)/2+3*l;
V(k) = (v-u)/2+2*u-3*l;
else
lmax = (u-1)/2;
l = round(lmax*rand);
U(k) = (v-u)/2+3*l;
V(k) = (v-u)/2+2*u-3*l;
end;
else
lmax = u;
l = round(lmax*rand);
if rem(l,2) == 0
U(k) = (v-u-1)/2+(3*l/2);
V(k) = (v-u-1)/2+2*u-(3*l/2)+1;
else
U(k) = (v-u-1)/2+((3*l+1)/2);
V(k) = (v-u-1)/2+2*u+((1-3*l)/2);
end;
end;
end;

```

```

end;%(4)
end;%(3)
end;%(2)
SumTotT = sum( U+V );
if any(U < 0) | any(V < 0)
disp( [';OJO! Hay u´s o v´s negativas en la iteración = ' num2str( i ) ] );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k para esta iteración = ' num2str( SumTotT ) ] );
break;
end;
if SumTotT ~ = SumN
disp( [';OJO! Se perdieron o ganaron u´s o v´s en la iteración = ' num2str( i ) ] );
disp( ['U(k)+V(k) para toda k para esta iteración = ' num2str( SumTotT ) ] );
disp( ['U(k)+V(k) inicial = ' num2str( SumN ) ] );
break;
end;
if T == Tmax
fprintf( fid, '%6.0f', j );
fprintf( fid, '\t %6.0f', i );
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t %6.0f', U(qqq) );
end;
for qqq = 1:M,
fprintf( fid, '\t %6.0f', V(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
T = 0;
end;
T = T+1;
i = i+1;
NUo = U;

```



```

NV0 = V;
end;
end;%(1)
fclose( fid );
disp( 'Ya acabé...' );
%Subrutina condiciones iniciales normales
function [NU0, NV0] = na( x, xmax, Ntot, M, NU, NV, mediaU, mediaV, sigmaU, sigmaV
)
%Distribución normal para el autómata en los puntos especificados por el vector x, el cual,
para que la distribución este normalizada a 1, debe tener
%un paso constante.
%Esto es,  $x(i) - x(i-1) = \text{cte}$  para cualquier  $i$ .
%(Ojo esto implica que x representa aquí a un vector, ej. x=0:1:10)
%Constante gaussiana, es decir, la que normaliza a 1:
CU = 1/(sqrt( 2*pi ) * sigmaU);
CV = 1/(sqrt( 2*pi ) * sigmaV);
%Dependiendo de cuantas posiciones hay, cuantas x's, es el vector con los valores requeridos.
%Para hacer correctamente la distribución, hay que distribuir en el centro del intervalo
definido por xmax y después recorrer a la media deseada
%considerando las condiciones de frontera.
mediana = round(xmax/2);
ru = mediaU - mediana;
rv = mediaV - mediana;
gU = CU*exp( -(x-mediana).^2/(2*sigmaU^2) );
gV = CV*exp( -(x-mediana).^2/(2*sigmaV^2) );
bu = sum( gU );
gU = gU/bu;
bv = sum( gV );
gV = gV/bv;

```

%Una vez calculada la distribución normal para cada tipo de partículas se obtiene los porcentajes correspondientes.

$$U_c = N_U * g_U;$$

$$V_c = N_V * g_V;$$

$$U_{Uc} = \text{sum}(U_c);$$

$$V_{Vc} = \text{sum}(V_c);$$

$$\text{Sumc} = U_{Uc} + V_{Vc};$$

%Para mover a la media deseada, considerando las condiciones periódicas a la frontera

for ku = 1:M,

$$j_u = k_u + r_u;$$

if ju > M

$$j_u = j_u - M;$$

elseif ju < 1

$$j_u = j_u + M;$$

end;

$$U_o(j_u) = U_c(k_u);$$

end;

for kv = 1:M,

$$j_v = k_v + r_v;$$

if jv > M

$$j_v = j_v - M;$$

elseif jv < 1

$$j_v = j_v + M;$$

end;

$$V_o(j_v) = V_c(k_v);$$

end;

$$U_{Uo} = \text{sum}(U_o);$$

$$V_{Vo} = \text{sum}(V_o);$$

$$\text{Sum} = U_{Uo} + V_{Vo};$$

$$N_{Uo} = \text{round}(U_o * N_{\text{tot}});$$

```

NV0 = round(V0*Ntot);
SumN = sum(NU0) + sum(NV0);

```

promedios.m

%Programa para sacar los números de ocupación promedio para un ensamble a partir de Sim2.m (sin normalizar al número total de partículas.)

%Del programa Sim2.m ya se creo un archivo con extension .txt en donde hay R realizaciones de la evolución de la misma condición inicial, guardada

```
%cada Tmax, hasta imax
```

```
Archex = input ( 'Nombre del archivo donde están los datos: ', 's' );
```

```
eval ( ['load ' Archex '.txt' ] );
```

```
Archgr1 = input ( 'Nombre del archivo donde guardar los resultados del conjunto representativo: ', 's' );
```

```
evprom = input ( '¿Guardar ev. promedio?', 's' );
```

```
CCCC = 's';
```

```
if strcmp( evprom, 's' ) == 1
```

```
Archgr2 = input ( 'Nombre del archivo donde guardar los resultados de ev. del promedio: ', 's' );
```

```
end;
```

```
eval( ['size(' Archex ');'] );
```

```
Nx = (ans(2)-2)/2;
```

```
eval( ['size(' Archex ');'] );
```

```
Noren = (ans(1));
```

```
eval( ['NoEns = ' Archex '(:,1);'] );
```

```
eval( ['U = ' Archex '(:,3:' num2str( Nx+2 ) ');'] );
```

```
eval( ['V = ' Archex '(:, ' num2str(Nx+3) ':' num2str(2*Nx+2) ');'] );
```

```
xmin = 1;
```

```
xmax = Nx;
```

```
x = xmin:1:xmax;
```

```

%imax = max(iter);
ens = max(NoEns);
Tmax = Noren/ens;
eval( ['iter = ' Archex '(1:Tmax,2);'] );
%Calculo de los promedios por conjunto representativo
Uno = U(1:Tmax,:);
Vno = V(1:Tmax,:);
if strcmp( evprom, 's' ) == 1
fid = fopen( [Archgr2 '.txt'], 'wt' );
Up = Uno;
Vp = Vno;
mUpt = mean( Up' );
mVpt = mean( Vp' );
stdUpt = std( Up' );
stdVpt = std( Vp' );
itert = iter';
a = 0;
fprintf( fid, '%6.0f', a );
for qq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t %6.0f', itert(qq) );
end;
for qq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t %6.0f', itert(qq) );
end;
for qq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t %6.0f', itert(qq) );
end;
for qq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t %6.0f', itert(qq) );
end;

```

```

fprintf( fid, '\n' );
a = 1;
fprintf( fid, '%6.0f', a );
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', mUpt(qqq) );
end;
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', mVpt(qqq) );
end;
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', stdUpt(qqq) );
end;
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', stdVpt(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
end;
for n = 2:ens,
Un = (Uno + U(((n-1)*Tmax)+1:n*Tmax,:));
Vn = (Vno + V(((n-1)*Tmax)+1:n*Tmax,:));
Uno = Un;
Vno = Vn;
if strcmp( evprom, 's' ) == 1
Up = (1/n)*Un;
Vp = (1/n)*Vn;
mUpt = mean( Up' );
mVpt = mean( Vp' );
stdUpt = std( Up' );
stdVpt = std( Vp' );
fprintf( fid, '%6.0f', n );

```

```

for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', mUpt(qqq) );
end;
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', mVpt(qqq) );
end;
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', stdUpt(qqq) );
end;
for qqq = 1:Tmax,
fprintf( fid, '\t%f', stdVpt(qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
end;
end;
if strcmp( evprom, 's' ) == 1
fclose( fid );
end;
Up = (1/ens)*Un;
Vp = (1/ens)*Vn;
mUpt = mean( Up' );
mVpt = mean( Vp' );
stdUpt = std( Up' );
stdVpt = std( Vp' );
mUp = mUpt';
mVp = mVpt';
desUp = stdUpt';
desVp = stdVpt';
%Guardar información final
fid = fopen( [Archgr1 '.txt'], 'wt' );

```

```

for k = 1:Tmax,
fprintf( fid, '%6.0f', iter(k,1) );
fprintf( fid, '\t%f', mUp(k,1) );
fprintf( fid, '\t%f', mVp(k,1) );
fprintf( fid, '\t%f', desUp(k,1) );
fprintf( fid, '\t%f', desVp(k,1) );
for qqq = 1:Nx,
fprintf( fid, '\t%f', Up(k,qqq) );
end;
for qqq = 1:Nx,
fprintf( fid, '\t%f', Vp(k,qqq) );
end;
fprintf( fid, '\n' );
end;
fclose( fid );

```

gráficas.m

%Programa para generar graficas de evolución de Sim1 y Sim2, evolución de valores medios y de desviación estándar en cada Tmax iteraciones

%Del programa auto1.m o promedios.m ya se creo un archivo extensión .txt que contine la evolución de las funciones de distribución o los promedios

%de los números de ocupación.

```
Nombreach = input ( 'Nombre del archivo donde estan los datos: ', 's' );
```

```
eval ( ['load ' Nombreach '.txt'] );
```

```
eval( ['size(' Nombreach ');'] );
```

```
Nx = (ans(2)-5)/2;
```

```
eval( ['iter = ' Nombreach '(:,1);'] );
```

```
eval( ['mU = ' Nombreach '(:,2);'] );
```

```
eval( ['mV = ' Nombreach '(:,3);'] );
```

```

eval( ['desU = ' Nombreach '(:,4);'] );
eval( ['desV = ' Nombreach '(:,5);'] );
eval( ['U = ' Nombreach '(:,6:' num2str( Nx+5 ) ');'] );
eval( ['V = ' Nombreach '(:, ' num2str(Nx+6) ':' num2str(2*Nx+5) ');'] );
xmin = 1;
xmax = Nx;
x = xmin:1:xmax;
divU = (desU)./(mU);
divV = (desV)./(mV);
mediadivU = mean(divU);
mediadivV = mean(divV);
mmU = mean(mU);
mmV = mean(mV);
sumam = mmU + mmV;
mstdU = mean(desU);
mstdV = mean(desV);
disp( ['media en el tiempo de mUp : ' num2str( mmU )] );
disp( ['media en el tiempo de mVp : ' num2str( mmV )] );
disp( ['suma de medias: ' num2str( sumam )] );
disp( ['media de stdU: ' num2str( mstdU )] );
disp( ['media de StdV: ' num2str( mstdV )] );
disp( ['media de stdU/mU: ' num2str( mediadivU )] );
disp( ['media de StdV/mV: ' num2str( mediadivV )] );
surf( x, iter, U );
colormap(jet);
drawnow;
set(gca,'XDir','reverse','YDir','normal','ZDir','normal');
set(gca,'XGrid','on','YGrid','on','zGrid','on');
xlabel( 'j' );
ylabel( 'n' );

```



```

xlabel( 'u(j,n)' );
title( '"Evolución de u(j,n)"' );
view(120,20);
drawnow;
figure;
surf( x, iter, V );
colormap(jet);
set(gca,'XDir','reverse','YDir','normal','ZDir','normal');
set(gca,'XGrid','on','YGrid','on','zGrid','on');
xlabel( 'j' );
ylabel( 'n' );
xlabel( 'v(j,n)' );
title( '"Evolución de v(j,n)"' );
view(120,20);
drawnow;
figure;
plot( iter, mU, 'wx', iter, mV, 'wo' );
%set(gca,'XGrid','on','YGrid','on');
xlabel( 'n' );
ylabel( 'media[u(j,n)] (x), media[v(j,n)] (o)' );
title( '"media de u,v(j,n)) en cada n"' );
drawnow;
figure;
plot( iter, divU, 'wx', iter, divV, 'wo' );
%set(gca,'XGrid','on','YGrid','on');
xlabel( 'n' );
ylabel( 'std/media {u(j,n)} (x), std/ media{v(j,n)} (o)' );
title( '"std/media de u,v(j,n)) en cada n"' );
drawnow;

```